

Première partie

Le cadre théorique

Chapitre 1

L'ESPACE DES ÉTATS

1.1 Introduction.

L'espace est rapporté à un repère galiléen orthonormé direct $\{O; \vec{i}, \vec{j}, \vec{k}\}$ de coordonnées $\{x, y, z\}$. La position d'un objet classique est repérée, en première approximation par les coordonnées de son centre de masse. A la limite où ses dimensions spatiales tendent vers zéro, l'objet considéré devient un point matériel. A chaque instant, un point matériel est caractérisé par sa position et sa vitesse.

Dans le cadre de la mécanique ondulatoire, la notion de point matériel bien localisé, présentant une vitesse bien définie, disparaît. L'état du système physique formé par un point matériel est décrit par sa fonction d'onde, $\psi(x, y, z)$ où (x, y, z) représentent les coordonnées de position du point matériel considéré. Dans ce chapitre, nous allons étudier les propriétés de la fonction d'onde et préciser comment la connaissance de cette fonction permet d'obtenir certaines propriétés physiques du système qu'elle décrit.

Pour décrire un système physique formé de deux points matériels, il faut introduire une fonction de six coordonnées : $\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)$. Les coordonnées (x_1, y_1, z_1) sont les coordonnées de position du premier point matériel tandis que (x_2, y_2, z_2) sont celles du second. Un système formé par n points matériels est décrit par une fonction d'onde de $3n$ variables.

Ces fonctions d'onde changent avec le temps t , montrant ainsi une évolution du système physique. Cependant, dans ce chapitre nous considérons l'état du système à un instant t , donné et par conséquent, nous n'explicitons pas la dépendance temporelle de la fonction d'onde.

Nous limitons, ici, l'étude aux systèmes formés par un seul point matériel de masse m dont nous "oublions" le spin[†].

1.2 Propriétés mathématiques des fonctions d'onde.

La fonction d'onde est une fonction complexe des trois variables réelles, x, y, z . C'est une fonction continue à dérivée continue : on dit qu'elle est de classe \mathcal{C}_1 . Enfin, la fonction d'onde est une fonction de carré sommable.

$$(x, y, z) \mapsto \psi_{(x,y,z)} \in \mathbb{C}, \quad \psi \text{ est } \mathcal{C}_1 \text{ avec } \iiint |\psi|^2 d^3x < \infty \quad (1.1)$$

De façon générale, nous utilisons la convention $d^3x := dxdydz$; en outre, en l'absence de borne spécifiées, les intégrales portent sur la totalité de l'intervalle de variation : ainsi $\iiint (\) d^3x$ signifie $\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (\) dxdydz$.

[†]Le spin est un moment cinétique intrinsèque auquel est associé un moment magnétique. Le proton, le neutron et l'électron sont caractérisés par un spin non nul. Ces particules se comportent donc comme de petits aimants. Nous avons évoqué le spin à diverses reprises dans le fascicule I.

Pour représenter une situation physique, on utilise parfois des modèles qui ne décrivent pas la réalité en toute exactitude mais une situation simplifiée qui permet d'effectuer les calculs de façon complète. Par exemple, dans certaines conditions, l'énergie potentielle d'une particule est la fonction $V(x)$ de classe \mathcal{C}_1 passant de la valeur 0 pour $x < 0$ à la valeur V_0 pour $x > a$. La fonction $V(x)$ pourra parfois être remplacée par une fonction discontinue $Y = 0$ pour $x < 0$ et $Y = V_0$ pour $x > 0$.

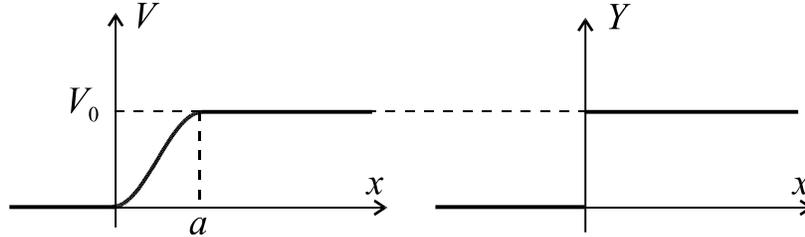


Figure 1-1.

L'énergie potentielle présentant alors une discontinuité (non physique), les fonctions d'onde ne présenteront pas nécessairement toute la régularité souhaitée. S'il le faut, pour traiter de tels modèles nous abandonnerons la continuité de la dérivée pour préserver la continuité de la fonction d'onde elle-même. La continuité de la fonction d'onde ne sera abandonnée qu'en dernier ressort.

Que l'on considère les ondes lumineuses ou les ondes de matière, la fonction $\psi = A e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ représente une onde dont les quanta ont une impulsion, $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, bien définie (voir dans le fascicule I, la conclusion du cours de *Physique Nucléaire et Atomique*). Il est aisé de vérifier qu'une telle fonction n'est pas une fonction de carré sommable. Cela signifie que le concept de particule d'impulsion bien définie est un concept limite qui ne trouve, en toute rigueur, aucune contre-partie dans la réalité. Cette notion est cependant fort utile ; elle décrit avec une très bonne approximation des situations physiques existant réellement. Pour ces raisons, nous utiliserons de telles fonctions d'onde bien qu'elles ne soient pas de carré sommable et ne correspondent, en toute rigueur, à aucune situation physique susceptible d'être vraiment réalisée.

1.3 Interprétation probabiliste de la fonction d'onde.

Une particule est décrite par sa fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ avec $\vec{r} = (x, y, z)$. Nous nous posons la question de savoir où est cette particule. Pour y répondre, il faut faire une mesure de position.

Précisons la question physique. Nous considérons un volume V . Lors d'une mesure de position, la particule est-elle trouvée dans le volume V ? La réponse à cette question est une réponse statistique. Le plus souvent il est impossible d'affirmer quoi que ce soit avec certitude, avant d'avoir effectué la mesure.

Considérons de multiples mesures de position portant toutes sur une particule de fonction d'onde ψ . Ces mesures peuvent être effectuées par les répétitions successives de la même mesure portant sur des particules préparées dans l'état ψ . Elles peuvent être obtenues en effectuant simultanément les mesures de position sur les particules d'une population nombreuse, toutes indépendantes les unes des autres et dans le même état

décrit par ψ . Quelle que soit la façon de procéder, on trouve que la proportion de particules dans le volume V , notée P_V , est[†]

$$P_V = \frac{\iiint_V |\psi|^2 d^3x}{\iiint |\psi|^2 d^3x} \quad (1.2)$$

Une telle propriété traduit le fait que le résultat d'une mesure de position effectuée sur une particule donnée suit une loi de probabilité : **la probabilité de trouver la particule dans le volume V est P_V , donné par l'expression 1.2.**

Il faut donc admettre qu'une particule n'est généralement pas localisée, puisqu'on peut la trouver soit dans V , soit en dehors de V . Les théories classiques (pré-quantiques) prévoient également que la détermination de la position d'une particule dans des conditions bien définies ne conduit pas toujours aux mêmes résultats lorsqu'on répète les expériences. Cependant les raisons en sont très différentes.

Dans le cadre classique, la particule est quelque part ; la dispersion des résultats tient au fait que les mesures ne sont pas parfaites. On réduit la dispersion en améliorant la qualité des mesures.

Dans le cadre quantique, même si on parvenait à réaliser des mesures idéales, la dispersion subsisterait. La seule certitude que l'on ait, c'est de ne pas trouver la particule là où la fonction d'onde, ψ , est nulle. Cette région de l'espace où ψ est non nulle est appelée "*support de la fonction ψ* ". Une particule est d'autant mieux localisée que le support de sa fonction d'onde est de petite extension. Une telle fonction est appelée "**paquet d'ondes**" ou "*groupe d'ondes*" par opposition à l'onde plane dont le support s'étend sur tout l'espace.

Il faut s'imaginer qu'une mesure résulte d'une interaction (mystérieuse) entre le système que l'on étudie et l'appareil de mesure. Cette interaction apparaît comme non déterministe, dans le sens où la connaissance de la fonction d'onde avant la mesure ne permet pas de prévoir avec certitude le résultat de la mesure (même si celle-ci est une mesure idéale)[‡].

Dans le cas d'un volume élémentaire dV entourant le point \vec{r} , il vient

$$dP = \frac{|\psi(\vec{r})|^2}{\iiint |\psi|^2 d^3x} dV \quad (1.3)$$

Remarquons que les expressions 1.2 et 1.3 ne sont définies que dans la mesure où ψ est une fonction de carré sommable.

De nombreuses expériences justifient l'interprétation donnée à la fonction d'onde : les expériences d'interférence électroniques par exemple.

Considérons le schéma d'une expérience d'interférence semblable à celle déjà décrite précédemment (fascicule I chapitre 5). Les électrons semblent provenir de deux fentes, S_1 et S_2 ; ils sont décrits par la superposition de deux ondes de matière. Sur l'écran E , au voisinage de l'axe de symétrie, il vient $\psi = Ae^{ikd_1} + Ae^{ikd_2}$.

[†]Pour être plus précis il faut dire que *presque certainement* P_V est d'autant plus *voisin de* la valeur donnée dans l'expression 1.2 que le nombre de particules observées est élevé.

[‡]Nous verrons que la fonction d'onde évolue suivant des lois déterministes sauf lors d'une mesure. Ce double comportement est source d'insatisfaction (cf. page x).

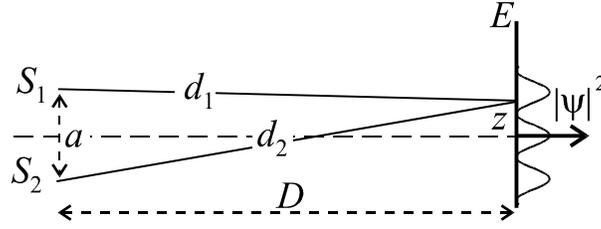


Figure 1-2.

On en déduit $|\psi|^2 = |A|^2 |1 + e^{ik\Delta}|^2$ où $\Delta = d_2 - d_1 \simeq z \frac{a}{D}$ (notations de la figure 1-2). On obtient $|\psi|^2 = 4|A|^2 \cos^2\left(\frac{k\Delta}{2}\right)$. En introduisant la longueur d'onde de de Broglie, $\lambda = \frac{2\pi}{k}$, il vient $|\psi|^2 \propto \cos^2\left(\frac{\pi a}{D\lambda} z\right)$. La probabilité de présence est maximale en $z = n \frac{\lambda D}{a}$, elle est nulle en $z = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\lambda D}{a}$. On règle le courant électronique à une valeur assez faible pour qu'à chaque instant, un seul électron soit présent dans l'appareil. Chaque électron est décrit par une onde. L'interaction de l'onde avec l'écran provoque la localisation de l'électron. C'est le phénomène de "**réduction du paquet d'ondes**". L'électron se localise sur l'écran suivant une densité de probabilité qui dépend de z , proportionnelle à $\cos^2\left(\frac{\pi a}{D\lambda} z\right)$. Chaque électron marque son point d'impact ; au fur et à mesure que les électrons atteignent l'écran, la figure d'interférence se construit (figure 1-3).



Figure 1-3.

La figure 1-3 montre la construction progressive des franges d'interférences électroniques lorsque les électrons atteignent l'écran l'un après l'autre. Dans chacune des figures, le nombre d'électrons ayant atteint l'écran est 100, 3000, 20000, 70000 (d'après A. Tanamura et al. *American journal of Physics*, **57**, p. 117-120 (1989)).

Dans le cas des interférences lumineuses, on obtient des résultats semblables lorsqu'on opère à très faible intensité. Cependant, le plus souvent, les flux de photons sont si élevés que la construction des franges d'interférences paraît instantanée quoi qu'il n'en soit rien (une intensité très faible de $10^{-3} \mu\text{W}$ dans le domaine visible, correspond à un flux de photons de l'ordre de $3 \cdot 10^9$ photons par seconde : trois milliards de photons par seconde!).

1.4 Densité de présence et de courant

Il est commode de considérer que la fonction ψ décrit un nombre N de particules, toutes dans le même état, et de supposer que $\rho(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$ représente la **densité**

moyenne, en \vec{r} , de ces particules, telle qu'elle serait observée lors de mesures répétées.

Dans ces conditions, $dN = |\psi(\vec{r})|^2 dV$ est le **nombre moyen de particules dans le volume élémentaire** dV (tel qu'on l'observerait lors de mesures répétées). En toute rigueur, il faudrait préciser que c'est presque certainement le nombre moyen que l'on observe, avec une erreur négligeable, lors d'une mesure portant sur un nombre de particules assez grand. Toutes ces précautions alourdissent la formulation des résultats; elles seront, le plus souvent sous-entendues.

Le nombre total de particules, toutes indépendantes et décrites par la même fonction d'onde ψ , est alors $N = \iiint |\psi|^2 d^3x$.

Avec l'interprétation précédente, la proportion de particules (trouvées) dans le volume dV (lors d'une mesure) est $dP = \frac{dN}{N} = \frac{|\psi(\vec{r})|^2}{\iiint |\psi|^2 d^3x} dV$. Suivant la loi des

grands nombres, c'est la probabilité pour qu'une particule choisie *a priori* soit trouvée dans le volume dV .

Dans le cas particulier d'une fonction d'onde plane, $\psi = A e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ on trouve $N = \infty$ car la fonction d'onde n'est pas de carré sommable. Cependant la densité de particules est finie et uniforme : $\frac{dN}{dV} = |\psi(\vec{r})|^2 = |A|^2$.

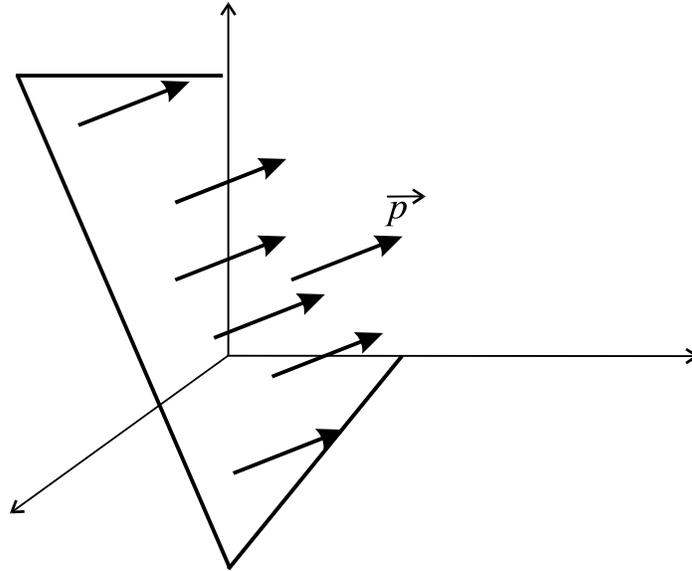


Figure 1-4.

La fonction d'onde $\psi = A e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ présente la symétrie plane (la valeur de ψ est la même en tous les points d'un même plan choisi arbitrairement, orthogonal à \vec{k}); l'onde ψ représente des particules (indépendantes et identiques) d'impulsion $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, réparties dans tout l'espace avec une densité uniforme $|A|^2$ (voir la figure 1-4).

Lorsque $N = \iiint \rho d^3x = 1$, la densité ρ est appelée "densité de présence" : ρdV est la probabilité pour que, lors d'une mesure, la particule soit trouvée dans le volume élémentaire dV .

Considérons un fluide classique qui s'écoule à la vitesse \vec{v} . Ce fluide est constitué de particules de masse m . Le nombre de particules par unité de volume est la densité ρ . On définit la densité de courant de particules $\vec{J} := \rho \vec{v}$.

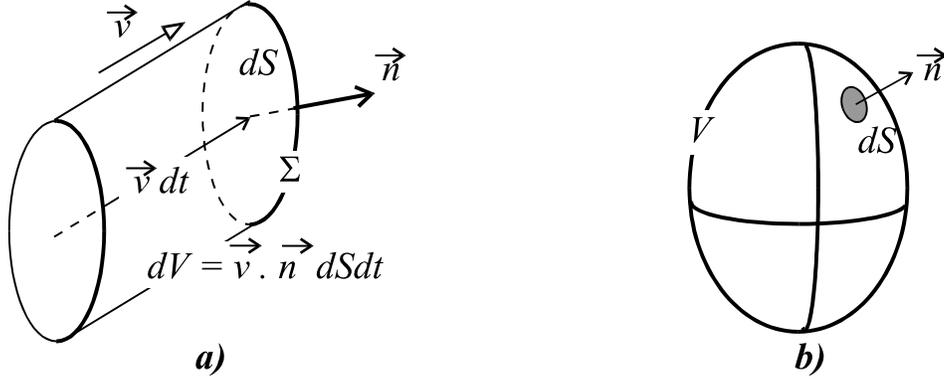


Figure 1-5.

Les particules qui traversent la surface infinitésimale Σ de la figure 1-5 a) pendant le temps dt sont celles qui sont contenues dans le volume dV . Leur nombre est $\rho dV = \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dS dt$ où \vec{n} est le vecteur unitaire normal à Σ et dS l'aire de Σ . Le flux de particules sur Σ est le nombre de particules qui traversent l'unité de surface de Σ pendant l'unité de temps : $\Phi = \vec{J} \cdot \vec{n}$.

Considérons le volume fermé de la figure 1-5 b). Le nombre de particules sortant du volume V , pendant dt est $dN_{exit} = \iint_{\Sigma_V} \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dS dt = dt \times \iint_{\Sigma_V} \vec{J} \cdot \vec{n} dS$ où \iint_{Σ_V} est étendue à la surface Σ_V qui limite le volume V . Le théorème d'Ostrogradsky conduit à la relation

$$\frac{dN_{exit}}{dt} = \iiint_V \text{div} [\vec{J}] d^3x \quad (1.4)$$

Considérons une onde plane $\psi = A e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$, fonction d'onde de particules de masse m . L'impulsion des particules est $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, leur vitesse est donc $\vec{v} = \hbar \vec{k} / m$. La densité de courant correspondant est $\vec{J} := \rho \hbar \vec{k} / m$ avec $\rho = |A|^2$. On vérifie la relation

$$\vec{J}_{(\vec{r})} = \frac{-i\hbar}{2m} (\bar{\psi} \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \bar{\psi})_{(\vec{r})} \quad (1.5)$$

où $\bar{\psi}$ est le conjugué complexe de ψ . C'est cette **définition de la densité de courant quantique** que nous retiendrons dans le cas général, même lorsque la fonction d'onde n'est pas une onde plane.

Lorsqu'on expérimente sur des nombres élevés de particules, celles-ci constituent un fluide. La loi des grands nombres nous assure alors que la densité de courant quantique

est identique à la densité de courant observé (avec toutes les précautions d'usage). Par contre si on considère une seule particule le fluide devient un **fluide de probabilité**. Sa répartition dans l'espace, son comportement au cours du temps permettent de visualiser les propriétés de la particule décrite : probabilité de présence et évolution au cours du temps.

1.5 L'espace de Hilbert des états physiques

Il est utile de clairement distinguer les propriétés des fonctions d'onde (*par exemple* 1.1) et l'interprétation physique que l'on en fait (*par exemple* 1.2 et 1.3).

Les résultats obtenus en mathématiques montrent que l'ensemble des fonctions d'onde forme un espace vectoriel (c'est une propriété mathématique). Cet espace, \mathcal{E} , est appelé "**espace des états**". En effet, **la fonction d'onde donne une description complète du système physique considéré** (c'est un postulat de physique) et définit par conséquent un état physique.

Considérée comme une fonction, la fonction d'onde, $\vec{r} \mapsto \psi(\vec{r})$ est notée ψ ou $\psi(\vec{r})$; considérée comme un élément d'un espace vectoriel, la même fonction d'onde est notée $|\psi\rangle$. La figure 1-6 donne deux images utiles et complémentaires de la somme de deux fonctions d'ondes.

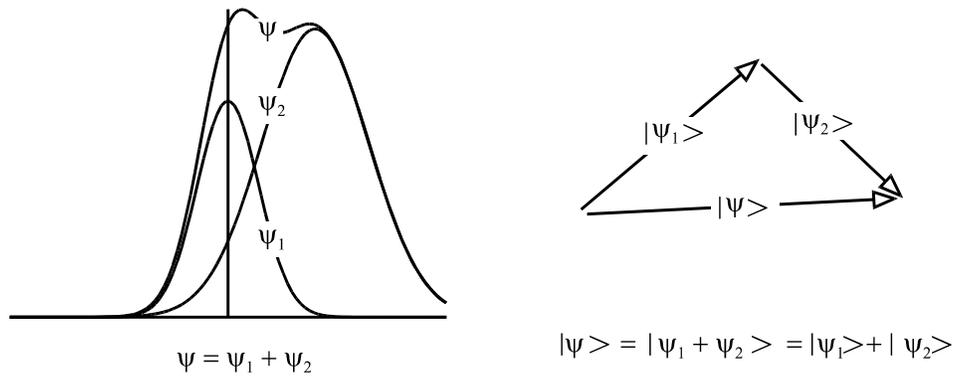


Figure 1-6.

L'espace des états est muni d'un produit scalaire. Etant donné deux états physiques décrits par leur fonction d'onde, ψ et φ , on définit le **produit scalaire** $\langle \psi | \varphi \rangle$:

$$\langle \psi | \varphi \rangle := \iiint \bar{\psi}(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) d^3x \tag{1.6}$$

où $\bar{(\)}$ est le conjugué complexe de $(\)$.

On remarque que les propriétés suivantes sont satisfaites

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \overline{\langle \varphi | \psi \rangle}$$

$$\langle \psi | \varphi_1 + a\varphi_2 \rangle = \langle \psi | \varphi_1 \rangle + a \langle \psi | \varphi_2 \rangle \text{ et } \langle \psi_1 + a\psi_2 | \varphi \rangle = \langle \psi_1 | \varphi \rangle + \bar{a} \langle \psi_2 | \varphi \rangle$$

quel que soit le nombre complexe a ,

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0 \text{ avec } \langle \psi | \psi \rangle = 0 \Leftrightarrow \psi = 0$$

Munis de ce produit scalaire, l'espace des états est un espace de Hilbert. Ce serait sans grand intérêt pour le physicien si le produit scalaire ainsi défini n'était pas étroitement relié aux propriétés physiques, en particulier aux prédictions des résultats de mesure comme nous le verrons au chapitre suivant.

1.6 Un modèle de référence à une dimension : le puits infini

Considérons une particule de masse m , dont la fonction d'onde est fonction de la seule variable x . Nous supposons que la particule est piégée dans la région $x \in [0, L]$. Cela signifie que dans une mesure de position la particule est certainement trouvée dans cette région. D'après ce qui précède on en déduit la condition $\psi(x) = 0$ pour $x < 0$ ou $x > L$.

Pour fixer les idées, considérons une particule chargée, un électron e^- par exemple. Créons un potentiel électrostatique suivant le schéma de la figure 1-7 a). L'énergie potentielle, $V(x)$, de la particule dépend de sa position. Le graphe de $V(x)$ est représenté sur la figure 1-7 b) où nous avons utilisé l'approximation de la figure 1-1 pour représenter les sauts d'énergie potentielle entre les régions I et II d'une part et II et III d'autre part. C'est généralement légitime pour $a \ll \lambda < L$ où λ est la longueur d'onde de de Broglie dans la région II (rappelons que, p étant l'impulsion d'une particule, sa longueur d'onde de de Broglie est $\lambda = \frac{hP}{p}$).

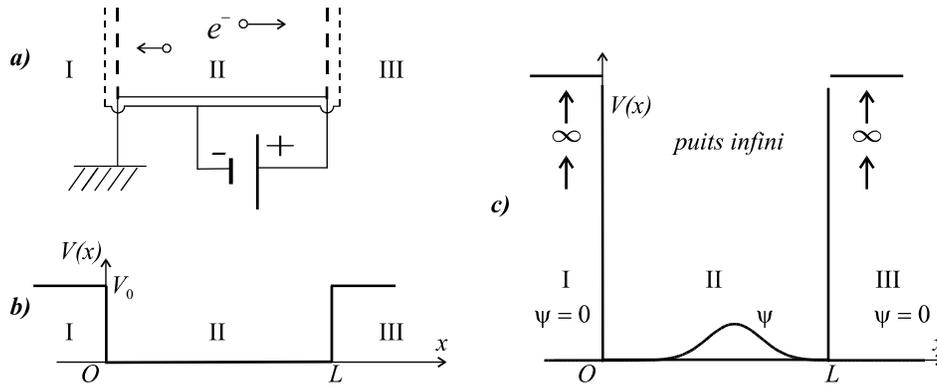


Figure 1-7.

Dans les régions I et III l'énergie potentielle est donc V_0 , tandis qu'elle est nulle (par convention) dans la région II. Une telle configuration constitue un *puits d'énergie potentielle*, souvent appelé "puits de potentiel" par abus de langage.

Une particule classique d'énergie cinétique E_c et d'énergie potentielle V possède l'énergie $E = E_c + V$. De façon générale l'énergie cinétique est positive ou nulle : $E_c = E - V \geq 0$. Si l'énergie de la particule satisfait les relations $0 < E < V_0$, les régions I et III qui correspondrait à $E_c < 0$, lui sont inaccessibles. La particule classique est alors piégée dans la région II.

La situation est différente en mécanique ondulatoire. Dans le cas $0 < E < V_0$, nous verrons qu'une **onde évanescente** est présente dans les régions I et III où la fonction d'onde tend exponentiellement vers zéro lorsqu'on s'éloigne du puits. L'énergie E étant fixée, lorsque $V_0 \rightarrow \infty$, l'onde évanescente disparaît et la fonction d'onde devient nulle dans les régions I et II : $\psi(x) = 0$ pour $x < 0$ ou $x > L$. On est alors en présence d'un "**puits infini**" (figure 1-7 c). Par continuité la fonction d'onde, ψ , s'annule sur les bords du puits, à l'intérieur en $x = 0$ ou $x = L$ (*i.e.* pour $x \rightarrow 0^+$ ou $x \rightarrow L^-$).

On introduit les fonctions $u_n(x)$ où $n = 0, 1, 2, \dots$

$$u_n(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x \notin [0, L] \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & \text{pour } x \in [0, L] \end{cases} \quad (1.7)$$

Les fonctions u_n et ψ peuvent être considérées comme des fonctions de x/L . Compte tenu des conditions aux limites imposées en $x = 0$ et $x = L$, les résultats obtenus en mathématiques concernant les fonction de $L^2(0, 1)$ permettent d'affirmer que ψ est une combinaison linéaire des fonctions u_n [†] :

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n u_n(x) \quad (1.8)$$

On peut démontrer que si l'on imposait en outre la continuité de la dérivée de ψ , les coefficients a_n seraient nuls. La fonction ψ serait alors identiquement nulle. La particule décrite ne serait nulle part ! Nous devons donc abandonner cette condition pour décrire une particule piégée dans le puits infini.

Les fonctions ψ qui décrivent une particule piégée dans le puits infini forment un espace vectoriel, \mathcal{E}_p . De ce point de vue on écrit 1.8 sous la forme

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n |u_n\rangle \quad (1.9)$$

$\{|u_n\rangle\}$ apparaît comme une base de \mathcal{E}_p . Remarquons que \mathcal{E}_p est inclus dans l'espace \mathcal{E} des fonctions de carré sommable. \mathcal{E}_p représente l'ensemble des états accessibles compte tenu des conditions aux limites imposées. Alors que \mathcal{E} est un espace très riche, il arrive souvent que l'espace des états accessibles soit de petite dimension. C'est dans l'espace des états accessibles que nous étudions les problèmes physiques.

Lorsqu'on considère les problèmes à une dimension, la définition du produit scalaire donnée par la relation 1.6 est remplacée par la définition suivante :

$$\psi = \psi(x), \quad \varphi = \varphi(x); \quad \langle \psi | \varphi \rangle := \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(x) \varphi(x) dx \quad (1.10)$$

On peut alors calculer le produits scalaire $\langle u_n | u_m \rangle$:

$$\langle u_n | u_m \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{u}_n(x) u_m(x) dx = \int_0^L \frac{2}{L} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) dx = \delta_{nm} \quad (1.11)$$

où δ_{nm} est le **symbole de Kronecker** $\delta_{nm} := \begin{cases} 1 & \text{pour } n = m \\ 0 & \text{pour } n \neq m \end{cases}$.

La base $\{|u_n\rangle\}$ apparaît comme une base orthonormée.
Les états $|\psi\rangle$ et $|\varphi\rangle$ se développent sur la base $\{|u_n\rangle\}$:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n |u_n\rangle \quad \text{et} \quad |\varphi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} b_n |u_n\rangle \quad (1.12)$$

[†]Cette propriété a été utilisée lors de l'étude du *rayonnement à l'équilibre thermodynamique*, lorsque nous avons introduit la notion de mode d'une cavité à une dimension (voir le chapitre 3 du fascicule I).

Les propriétés du produit scalaire conduisent aux expressions

$$a_n = \langle u_n | \psi \rangle, \quad b_n = \langle u_n | \varphi \rangle \quad (1.13)$$

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(x) \varphi(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{a}_n b_n \quad (1.14)$$

On verra en annexe (page 15) un exemple dans lequel le formalisme précédent est mis en oeuvre pour obtenir la décomposition d'un paquet d'onde.

1.7 Bases continues à une dimension.

Considérons les fonctions d'ondes les plus générales, $\psi(x)$ définies sur tout \mathbb{R} . Le produit scalaire de deux états est donné par la relation 1.10.

Définissons la fonction $u_p(x) := \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$. A l'instar de l'optique, une telle fonction représente des particules d'impulsion p , bien définie. L'onde la plus générale est de la forme

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Lambda(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} dp = \int_{-\infty}^{+\infty} \Lambda(p) u_p(x) dp \quad (1.15)$$

L'existence de la décomposition ci-dessus est une conséquence des propriétés mathématiques des fonctions d'onde.

La relation 1.15 s'interprète comme la décomposition de $\psi(x)$ sous la forme d'une combinaison linéaire des fonctions $u_p(x)$, les coefficients de cette décomposition étant les quantités $\Lambda(p)$. L'indice discret, n , de l'équ. 1.12 est devenu le paramètre continu p , tandis que la somme $\sum_{n=1}^{\infty} (\)$ est devenue l'intégrale $\int_{-\infty}^{+\infty} (\) dp$.

L'ensemble des fonctions $\{u_p(x)\}$ apparaît donc comme une base de l'espace des fonctions d'onde. Chaque vecteur de cette base est repéré par l'indice continu p . Pour insister sur cette structure d'espace vectoriel, on écrira la relation 1.15 sous la forme

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Lambda(p) |u_p\rangle dp \quad (1.16)$$

Le produit scalaire $\langle u_p | u_q \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} e^{i(q-p)x/\hbar} dx$ n'est pas défini au sens des fonctions. Cependant, on peut le définir au sens des distributions en posant

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \langle u_p | u_q \rangle G(q) dq := \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{1}{2\pi\hbar} e^{i(q-p)x/\hbar} G(q) \right) dx$$

au lieu de $\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} e^{i(q-p)x/\hbar} dx \right) G(q) dq$. En effet, sous cette dernière forme, l'intégrale ne serait pas définie; c'est la raison pour laquelle on échange l'ordre des intégrations pour donner un sens à cette quantité.

On démontre la relation $\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{1}{2\pi\hbar} e^{i(q-p)x/\hbar} G(q) \right) dx = G(p)$. On en déduit

$$\langle u_p | u_q \rangle = \delta(p - q) \quad (1.17)$$

où $\delta(p - q)$ est la fonction généralisée de Dirac[†].

[†]Se reporter au cours de mathématiques pour les propriétés de la fonction de Dirac, δ . Rappelons seulement les relations : $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(u - \lambda) du = 1$, $\int_{-\infty}^{+\infty} f(u) \delta(u - \lambda) du = f(\lambda)$ et $\delta(u - \lambda) = \delta(\lambda - u)$.

On démontre alors les relations suivantes

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Lambda(p) |u_p\rangle dp \quad \text{et} \quad |\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(p) |u_p\rangle dp \Rightarrow \quad (1.18)$$

$$\Lambda(p) = \langle u_p | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx \quad (1.19)$$

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\Lambda}(p) \Gamma(p) dp \quad (1.20)$$

On reconnaît dans les relations 1.15 et 1.19 l'expression d'une transformée de Fourier et de sa transformée de Fourier inverse.

Un parallèle peut être établi entre les bases discrètes $\{|u_n\rangle\}$ avec $n = 1, 2, \dots$ et les bases continues $\{|u_\lambda\rangle\}$ avec $\lambda \in (-\infty, +\infty)$.

$n, m \in \mathbb{N}$	\longleftrightarrow	$\lambda, \mu \in \mathbb{R}$	(1.21)
$u_n(x), u_n\rangle$	\longleftrightarrow	$u_\lambda(x), u_\lambda\rangle$	
δ_{nm}	\longleftrightarrow	$\delta(\lambda - \mu)$	
$\sum_{n \in \mathbb{N}} ()_n$	\longleftrightarrow	$\int_{-\infty}^{+\infty} ()_{(\lambda)} d\lambda$	

On vérifiera que les correspondances 1.21 sont celles établies précédemment et rappelées ci-dessous (où p et q sont des indices continus).

équ.	$n, m \in \mathbb{N}$	\longleftrightarrow	$p, q \in \mathbb{R}$	équ.	(1.22)
1.11 :	$\langle u_n u_m \rangle = \delta_{nm}$	\longleftrightarrow	$\langle u_p u_q \rangle = \delta(p - q)$: 1.17	
1.12 :	$\left \begin{array}{l} \psi\rangle = \sum a_n u_n\rangle \\ \varphi\rangle = \sum b_n u_n\rangle \end{array} \right.$	\longleftrightarrow	$\left \begin{array}{l} \psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Lambda(p) u_p\rangle dp \\ \varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(p) u_p\rangle dp \end{array} \right.$: 1.18	
1.13 :	$a_n = \langle u_n \psi \rangle$	\longleftrightarrow	$\Lambda(p) = \langle u_p \psi \rangle$: 1.19	
1.14 :	$\langle \psi \varphi \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \bar{a}_n b_n$	\longleftrightarrow	$\langle \psi \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\Lambda}(p) \Gamma(p) dp$: 1.20	

En utilisant la définition de la fonction généralisée de Dirac, $\delta(x - \lambda)$, il vient

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(\lambda) \delta(x - \lambda) d\lambda$$

Cette expression s'interprète comme la décomposition de $\psi(x)$ sur la base des fonctions de Dirac $\delta(x - \lambda)$. Les coefficient de la décomposition s'expriment en fonction de ψ ; ce sont les quantités $\psi(\lambda)$.

$\delta(x - \lambda)$ est représenté par la limite d'une fonction positive, $f_\varepsilon(x)$, satisfaisant la relation $\int_{-\infty}^{+\infty} f_\varepsilon(x) dx = 1$, dont le support est un intervalle de largeur ε qui contient le point d'abscisse λ tandis que ε tend vers zéro (figure 1-8).

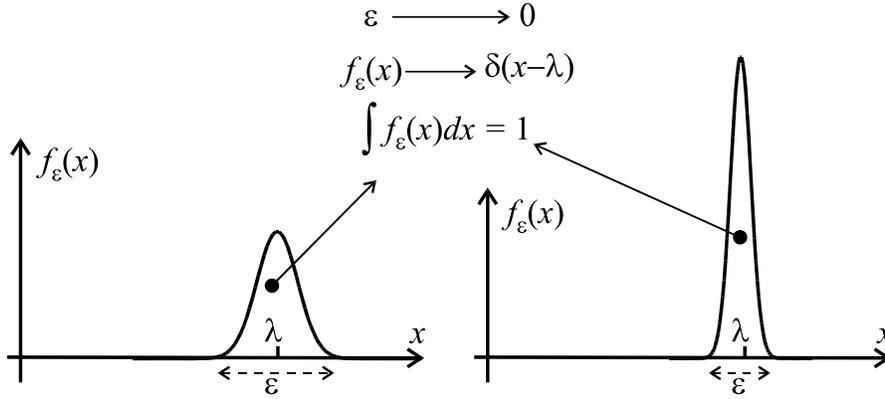


Figure 1-8.

On peut considérer que $\delta(x - \lambda)$ est la fonction d'onde d'une particule qui est très bien localisée en $x = \lambda$. Ici encore, la fonction d'onde $\delta(x - \lambda)$ n'est pas une fonction de carré sommable. Ce n'est même pas une "vraie" fonction ! Cependant pour les mêmes raisons qui nous ont fait accepter $u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ parmi les fonctions d'onde, nous acceptons $\delta(x - \lambda)$.

L'état correspondant est noté $|\delta_\lambda\rangle$. On vérifie la relation $\langle \delta_\lambda | \delta_\mu \rangle = \delta(\lambda - \mu)$.

On établit aisément les relations analogues à celles du tableau 1.22. Ce faisant on vérifie la correspondance 1.21.

Les expressions précédentes se généralisent sans difficulté pour des fonctions d'onde de l'espace à 3 dimensions :

une dimension	trois dimensions
$u_p(x) = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$	$\rightarrow u_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$
$\delta(x - \lambda)$	$\rightarrow \delta(\vec{r} - \vec{\lambda})$
$\int_{-\infty}^{+\infty} () dx$	$\rightarrow \iiint () d^3x$

où l'on a posé $\vec{r} = (x, y, z)$, $\vec{\lambda} = (\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z)$ et $\delta(\vec{r} - \vec{\lambda}) := \delta(x - \lambda_x) \delta(y - \lambda_y) \delta(z - \lambda_z)$.

1.8 Les unités

Nous donnons les unités des diverse grandeurs introduites :

	unités
nombre de particules : $N, dN, d\mathcal{N}_{exit}$	$\rightarrow 1$
produit scalaire : $\langle \psi \varphi \rangle$	$\rightarrow 1$
probabilité : P_V, dP	$\rightarrow 1$
fonction de Dirac : $\delta(u)$	$\rightarrow 1/u$
vecteur d'onde : \vec{k}	$\rightarrow \text{m}^{-1}$
pulsation : ω	$\rightarrow \text{s}^{-1}$
termes de phase : $\omega t, \vec{k} \cdot \vec{r}$	$\rightarrow 1$

" 1 " représente un nombre pur, sans dimensions.

Dans les modèles à une dimension et dans les modèles à trois dimensions, les unités sont différentes. Cela tient en particulier à la modification du produit scalaire qui est toujours un nombre pur, sans dimension.

En outre, lorsqu'on passe de trois dimensions à une seule, la densité volumique de particules (en m^{-3}) devient la densité linéaire de particule (en m^{-1}) tandis que le flux devient le nombre de particules qui passent en un point donné par unité de temps (en s^{-1}) au lieu du nombre de particules qui traversent une unité de surface dans l'unité de temps (en $\text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$). Dans les modèles à une dimension la densité de courant (en abrégé le "courant") s'identifie au flux de particules.

modèle à trois dimensions	modèle à une dimension
fonction d'onde : $\psi(\vec{r}), \varphi(\vec{r})$	fonction d'onde : $\psi(x), \varphi(x)$
$\langle \psi \varphi \rangle := \iiint \bar{\psi}(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) d^3x$	$\langle \psi \varphi \rangle := \int \bar{\psi}(x) \varphi(x) dx$
courant : $\vec{J} = \frac{-i\hbar}{2m} (\bar{\psi} \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \bar{\psi})$	courant : $J = \frac{-i\hbar}{2m} (\bar{\psi} \partial_x \psi - \psi \partial_x \bar{\psi})$
unités	unités
fonction d'onde : $\psi(\vec{r}) \rightarrow \text{m}^{-3/2}$	fonction d'onde : $\psi(x) \rightarrow \text{m}^{-1/2}$
$\langle \psi \varphi \rangle \rightarrow 1$	$\langle \psi \varphi \rangle \rightarrow 1$
densité : $\rho = \psi ^2 \rightarrow \text{m}^{-3}$	densité linéaire : $\rho = \psi ^2 \rightarrow \text{m}^{-1}$
densité de courant : $\vec{J} \rightarrow \text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$	courant : $J \rightarrow \text{s}^{-1}$
flux : $\Phi \rightarrow \text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$	flux : $\Phi = J \rightarrow \text{s}^{-1}$

On vérifiera sans difficulté que les dimensions et les unités des diverses grandeurs se déduisent des définitions posées.

Annexe

Nous étudions ici la décomposition d'un paquet d'ondes sur une base discrète de l'espace des états et, chemin faisant, nous détaillons la façon dont on passe d'un problème physique, portant sur des grandeurs dimensionnées, à un problème mathématique où seuls interviennent des nombres purs.

On considère un puits infini à une dimension : $V(X) = \begin{cases} \infty & \text{pour } X \notin [0, L] \\ 0 & \text{pour } X \in [0, L] \end{cases}$

où X est l'abscisse du point considéré.

Nous changeons la représentation de l'espace en introduisant la variable sans dimension $x = \alpha \frac{X}{L}$. Nous voulons que l'intervalle $[0, L]$ soit représenté par l'intervalle

$[0, 4]$ par exemple. Dans ce cas nous posons $x := 4 \frac{X}{L}$.

Etant donnée une fonction d'onde $\varphi(X)$, nous posons $\varphi(X) = \frac{2}{\sqrt{L}} \psi(x)$. La fonction ψ ainsi défini est donc une grandeur sans dimension (nombre pur). L'introduction du facteur $2 = \sqrt{4}$ sera justifiée plus loin.

Nous postulons que la valeur numérique du produit scalaire est indépendante de la représentation utilisée. En effectuant le changement de variable $x := 4 \frac{X}{L}$, il vient

$$\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = \int_0^L \overline{\varphi_1(X)} \varphi_2(X) dX = \int_0^4 \overline{\psi_1(x)} \psi_2(x) dx = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

Remarquons que l'introduction du facteur 2 dans la définition de $\psi(x)$ permet de conserver la forme du produit scalaire. Si nous avions posé $\varphi(X) = \frac{2\xi}{\sqrt{L}} \psi(x)$, nous aurions obtenu $\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int_0^4 |\xi|^2 \overline{\psi_1(x)} \psi_2(x) dx$.

La probabilité de présence sur dx est la probabilité de présence sur $dX = \frac{L}{4} dx$,

$$\text{c'est } \frac{|\varphi(X)|^2}{\langle \varphi | \varphi \rangle} dX = \frac{\left| \frac{2}{\sqrt{L}} \psi(x) \right|^2 L}{\langle \psi | \psi \rangle} \frac{L}{4} dx = \frac{|\psi(x)|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} dx.$$

Nous avons établi ainsi une correspondance entre les deux représentations qui permet de traiter les problèmes physiques en termes mathématiques. Remarquons que les formules précédentes s'obtiennent à partir des expressions générales en posant formellement $L = 4$.

Considérons la fonction $\psi(x)$, donnée qui représente un paquet d'ondes de support $[1, 3]$ dans le puits :

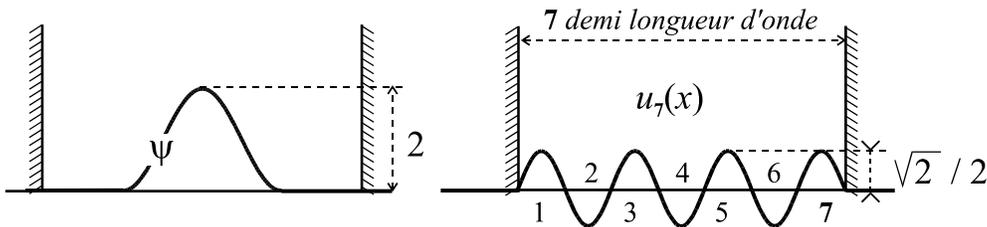
$$\psi(x) = \begin{cases} 1 + \cos(\pi x) & \text{pour } x \in [1, 3] \\ 0 & \text{pour } x \notin [1, 3] \end{cases} \quad (\text{A1})$$

La fonction $\psi(x)$ satisfait les conditions aux limites $\psi(0) = 0 = \psi(4)$, ainsi que les conditions de régularité requises.

La fonction ψ se décompose donc sur la base des fonctions $u_n(x)$

$$u_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{4}\right) & \text{pour } x \in [0, 4] \\ 0 & \text{pour } x \notin [0, 4] \end{cases} \quad (\text{A2})$$

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{n=\infty} a_n u_n(x) \Leftrightarrow |\psi\rangle = \sum_{n=1}^{n=\infty} a_n |u_n\rangle$$



La base $\{|u_n\rangle\}$ est orthonormée, on en déduit l'expression des coefficients a_n :

$$\begin{aligned}\langle u_m | u_n \rangle &= \delta_{nm} \Rightarrow a_k = \langle u_k | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{u}_k(x) \psi(x) dx \\ a_k &= \int_0^4 \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\left(\frac{k\pi x}{4}\right) \psi(x) dx\end{aligned}$$

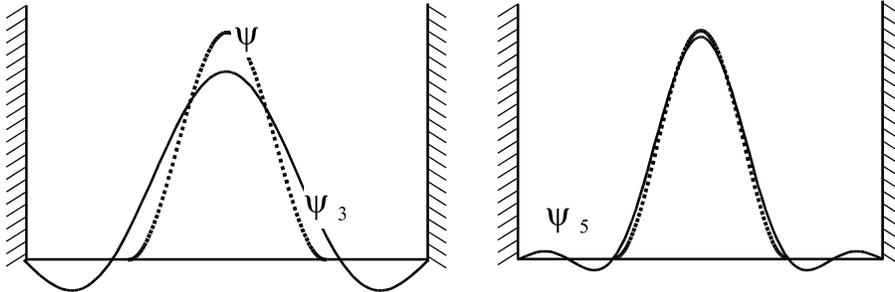
Avec $\psi(x) = \begin{cases} 1 + \cos(\pi x) & \text{pour } x \in [1, 3] \\ 0 & \text{pour } x \notin [1, 3] \end{cases}$, il vient

$$\begin{aligned}a_k &= \int_1^3 \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\left(\frac{k\pi x}{4}\right) (1 + \cos(\pi x)) dx \\ a_k &= \begin{cases} \frac{32\sqrt{2}}{\pi} \frac{\cos\left(\frac{3}{4}k\pi\right) - \cos\left(\frac{1}{4}k\pi\right)}{k(k^2 - 16)} & \text{pour } k \neq 4 \\ 0 & \text{pour } k = 4 \end{cases}\end{aligned}$$

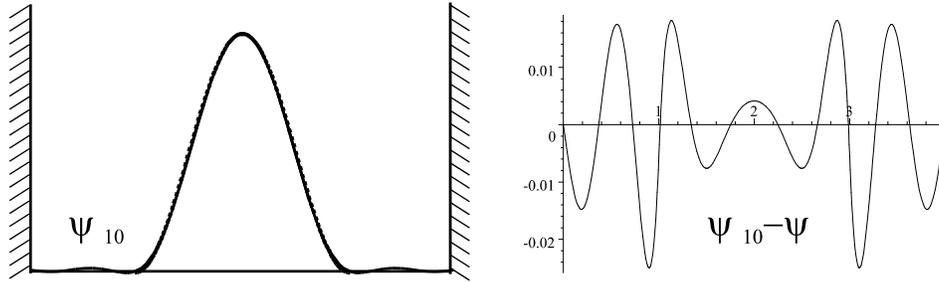
On note $|\psi_N\rangle = \sum_{k=1}^{k=N} a_k |u_k\rangle$. La fonction $\psi_N(x)$ est alors

$$\psi_N(x) = \begin{cases} \sum_{k=1}^{k=N} a_k \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\left(\frac{k\pi x}{4}\right) & \text{pour } x \in [0, 4] \\ 0 & \text{pour } x \notin [0, 4] \end{cases}$$

Nous approximos ψ par la série tronquée, $\psi_N(x)$. Les graphiques ci-dessous montrent comment évolue la précision, dans l'exemple considéré, lorsqu'on augmente le nombre, N , des termes pris en compte.

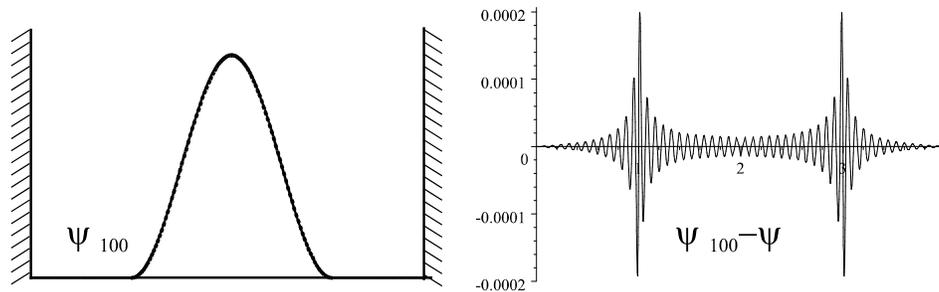


$$\begin{aligned}\psi_3 &= a_1 u_1(x) + a_3 u_3(x) \text{ car } a_2 = 0. \\ \psi_5 &= \psi_3 + a_5 u_5(x) \text{ car } a_4 = 0.\end{aligned}$$



$\psi_{10} = \sum_{k=1}^{k=10} a_n u_n(x)$ est une somme de 5 termes non nuls car $a_{2k} = 0$.
L'erreur, $|\psi_{10} - \psi|$, n'excède pas $0,02 = 1\%$ du maximum de ψ .

(1.23)



$\psi_{100} = \sum_{k=1}^{k=100} a_n u_n(x)$ est une somme de 50 termes non nuls car $a_{2k} = 0$.
L'erreur, $|\psi_{100} - \psi|$, n'excède pas $2 \cdot 10^{-4}$.

La précision croît avec le nombre de termes pris en considération.