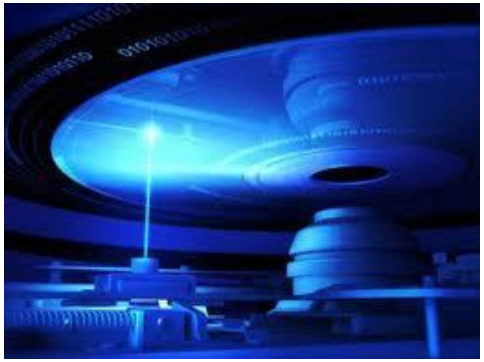
Micro et Nano Physique (MNP)

Cours 1 : les principes de la mécanique quantique

(approche conceptuelle)

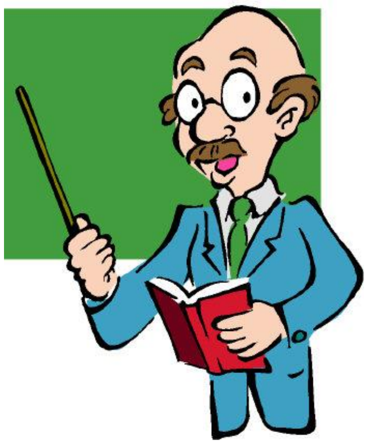
- Pourquoi un cours sur la physique microscopique ?
  - Une brique majeure de la physique contemporaine
  - Une nouvelle vision du monde
  - L’explication des phénomènes fondamentaux à la base des technologies du numérique



- Organisation de l’enseignement
  - Deux leçons introductives à la mécanique quantique, différenciées :
    - **Approche conceptuelle (A. Sibille)**
    - **Approche phénomènologique (C. Ware)**
  - Une série de TD et leçons de groupe sur la physique quantique
  - Deux leçons introductives à la physique statistique (A. Sibille et I. Zaquine) +2 TD
    - **Contrôle de connaissances 1**
  - Une leçon sur la physique de l’état solide
  - Une série de TD et TP
    - **Contrôle de connaissances 2**
- Equipe pédagogique : R. Alléaume, D. Erasme, R. Gabet, F. Grillot, H. Petit, A. Sibille, **C. Ware, I. Zaquine**

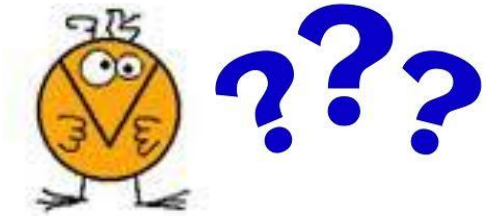
+

+



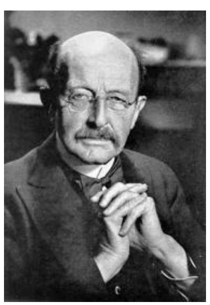
⇒

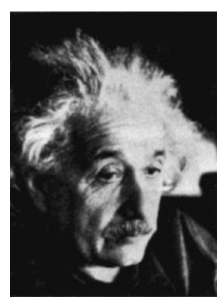
- A la fin du cours
  - Vous ne **maîtriserez pas la mécanique quantique**
  - Vous aurez à **peine entendu parler de physique statistique**
  - Vous ne serez **pas forts en composants** à semiconducteurs



- Mais alors, qu'aurez-vous appris ?
  - Vous aurez **perçu la richesse et la profonde logique de la mécanique quantique**
  - Vous saurez **utilisez les distributions statistiques essentielles** en physique des composants (Fermi-Dirac, Bose-Einstein) en sachant d'où elles viennent
  - Vous aurez **abordé l'étude des mécanismes physiques** qui déterminent les fonctionnalités des composants micro- et opto- électroniques

- Pourquoi une nouvelle physique ?
  - L'incapacité de la théorie classique à rendre compte des observations expérimentales (fin XIX^{e} siècle, début XX^{e})
  - Le bouillonnement intellectuel de cette période et la puissance créatrice de brillants esprits
- Des développements qui se sont étalés sur plus de deux décennies et constituent une extraordinaire aventure scientifique, expérimentale et théorique



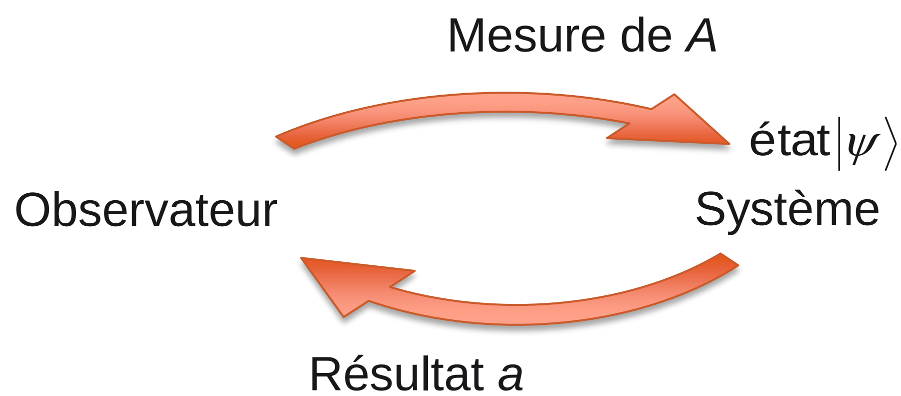




- Une approche conceptuelle de la nouvelle physique:
  - Conceptualiser l'observation expérimentale et ce qu'on peut en déduire
  - Admettre notre incapacité (humaine) à obtenir une connaissance complète du système observé (au sens classique)
  - En déduire des règles logiques (lois physiques) auxquelles doivent obéir le système et la connaissance que nous déduisons de l'observation (approche inductive)
- Dérouler les conséquences des nouvelles lois, les relier aux phénomènes physiques qui régissent le monde

La nouvelle physique doit être légitimée par l'observation !
(juge de paix)

Conceptualiser l’observation expérimentale

- La mécanique quantique exprime toute interaction entre un observateur et le monde physique comme un **processus de mesure**. Quelles en sont les conséquences ?
  - Mesure = opération sur le système
  - Le résultat de la mesure dépend de l’état physique (= état quantique) du système

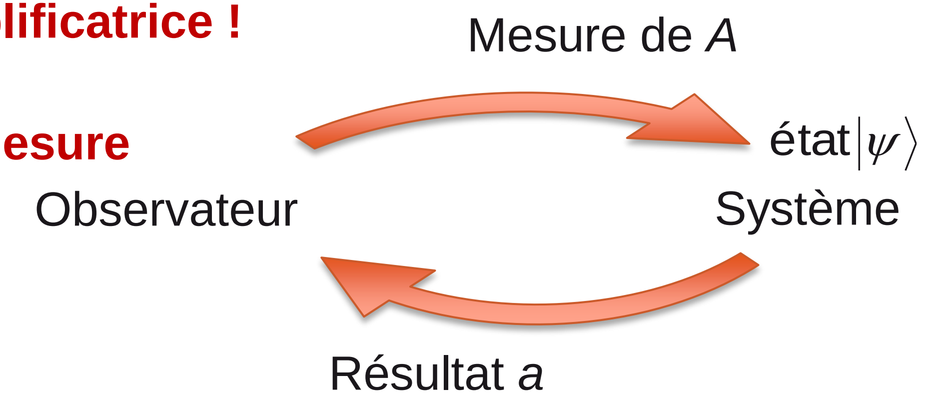


- Conceptualiser l'observation expérimentale
  - Comment décrire cette opération ?
  - Comment décrire l'état $|\psi\rangle$?
  - Quel peut être le résultat de la mesure ?

<u>Remarque :</u> la recherche des lois expliquant le monde est sous-tendue par un objectif universel de simplicité

➔ **Adoptons une approche simplificatrice !**

➔ **Cherchons à représenter la mesure par un opérateur linéaire**



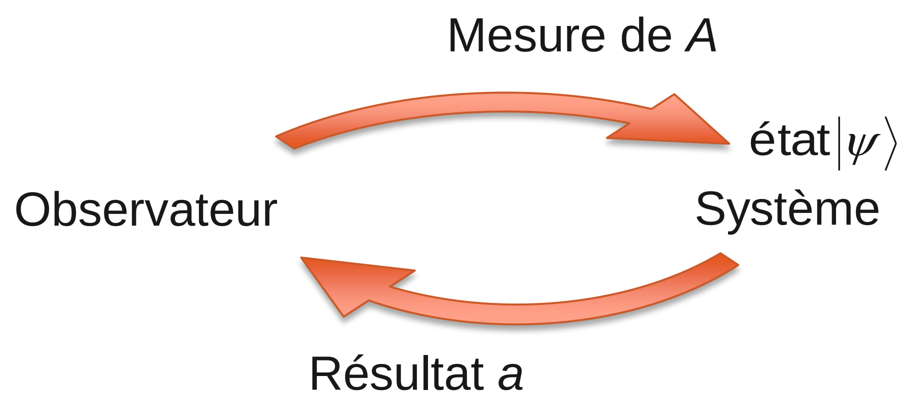
- Conceptualiser l'observation expérimentale
  - On postule que la mesure se traduit par l'action d'un certain opérateur linéaire :

    $$\hat{A}|\psi\rangle$$

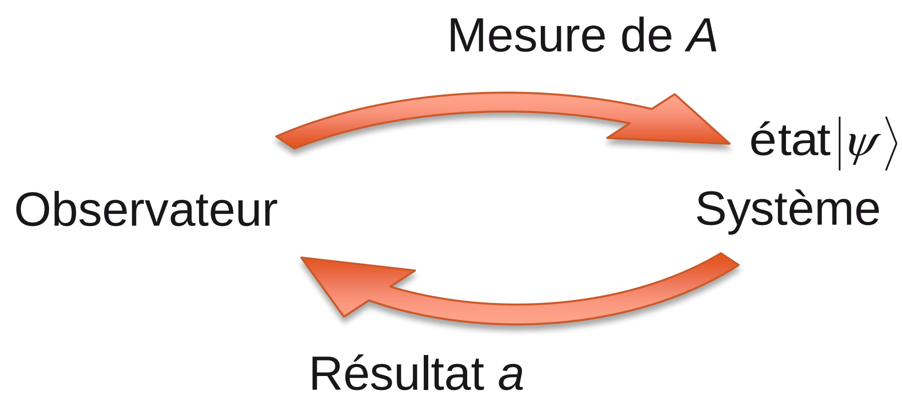
    ceci sous-entend qu'on sait combiner linéairement des états :

    $$\hat{A}\left(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle\right) = \lambda_1\hat{A}|\psi_1\rangle + \lambda_2\hat{A}|\psi_2\rangle$$

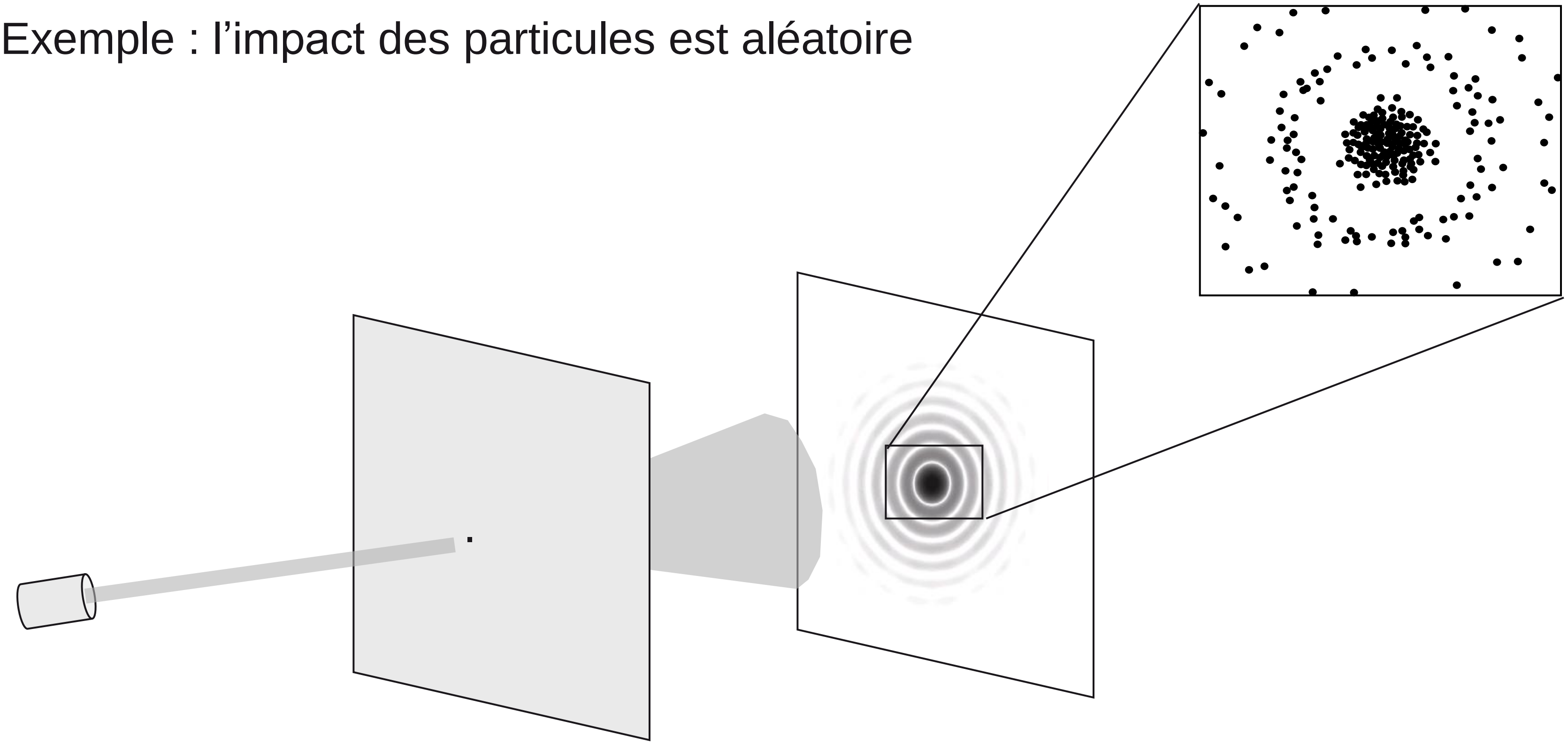
  - Quid de tout ça ???
- Admettons provisoirement ce **principe de superposition**…



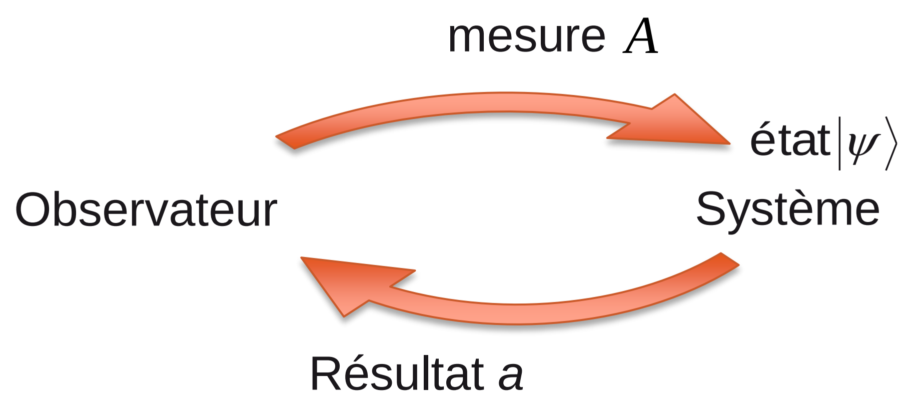
- Conceptualiser l’observation expérimentale
  - Comment relier le résultat *a* de la mesure à $\hat{A}|\psi\rangle$?
- Que nous dit l’expérimentation ?
  - On ne trouve pas toujours le même résultat !
    - Même en reproduisant parfaitement les conditions de mesure
    - Même si le système mesuré est toujours préparé dans le même état !



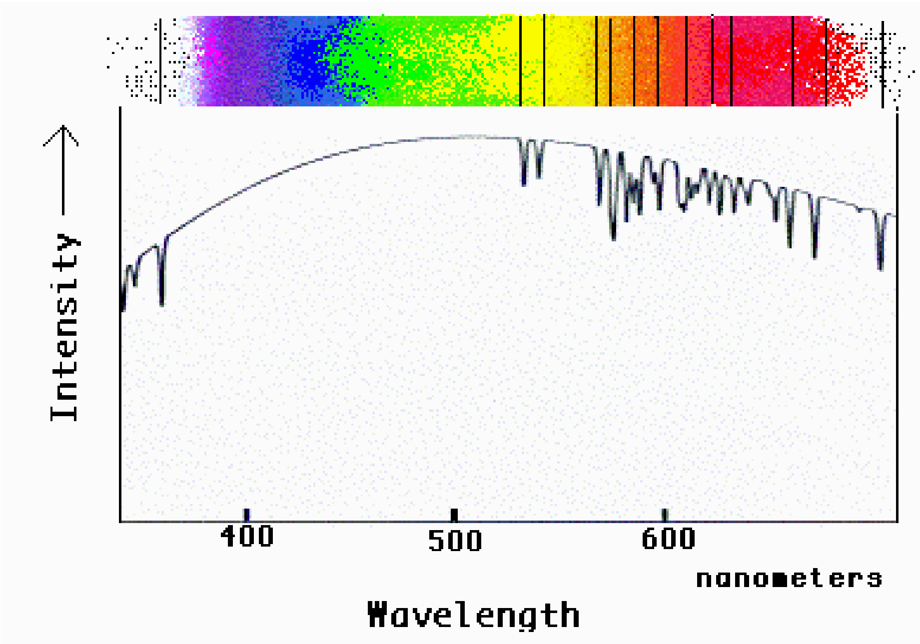
- Exemple : l’impact des particules est aléatoire

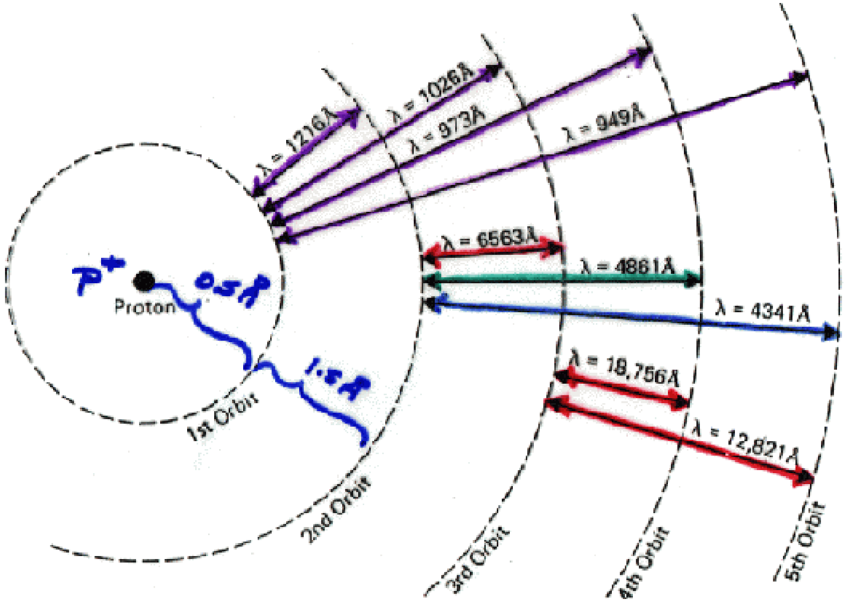


- Conceptualiser l'observation expérimentale
  - Comment relier le résultat *a* de la mesure à $\hat{A}|\psi\rangle$?
- Que nous dit l'expérimentation ?
  - **Le résultat d'une mesure est (fondamentalement) aléatoire !**



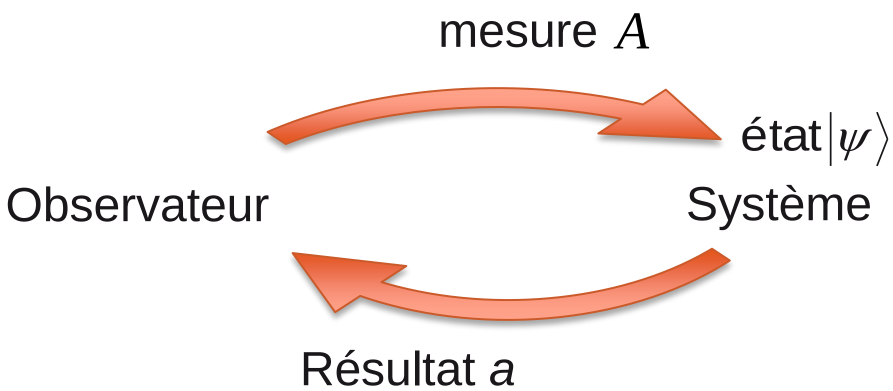
- Autre exemple : la mesure d'absorption d'énergie lumineuse par les atomes





- Conceptualiser l'observation expérimentale
  - Comment relier le résultat *a* de la mesure à $\hat{A}|\psi\rangle$?
- Que nous dit l'expérimentation ?
  - **Contrairement à la physique classique, certains résultats sont interdits !**

De plus en plus mystérieux…



Conceptualiser l'observation expérimentale

- Peut-on trouver un ensemble de résultats de mesure possibles de la grandeur A qui traduisent les caractéristiques de l'opérateur $\hat{A}$?

➔ **Les valeurs propres !**

Eureka !

(**Principe de quantification**)

mesure A

état $|\psi\rangle$

Observateur

Système

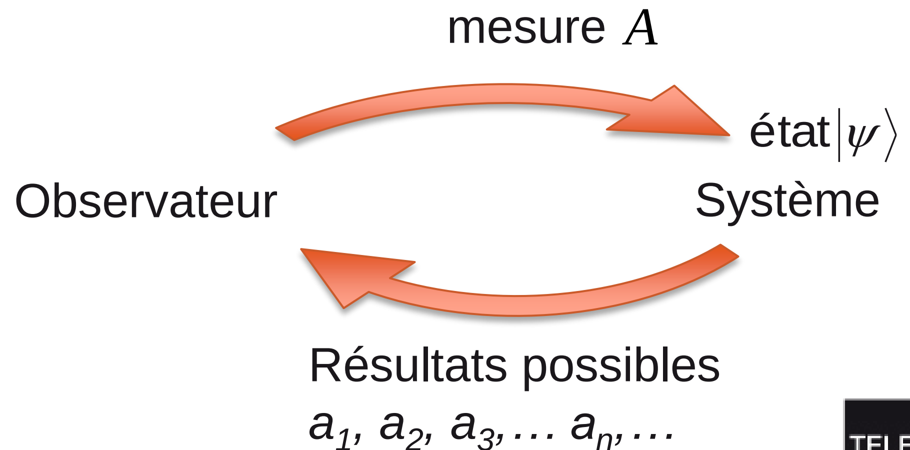
Résultats possibles

$a_1, a_2, a_3, \ldots a_n, \ldots$

Conceptualiser l’observation expérimentale

- Résumons :
  - À une grandeur physique *A* on associe un certain opérateur linéaire $\hat{\mathrm{A}}$ dont les valeurs propres sont les résultats possibles de la mesure de *A*
  - Cet opérateur agit sur l’état quantique $|\psi\rangle$, représentant l’état physique du système au moment de la mesure, qui appartient à un certain espace vectoriel

Comment relier tout cela au caractère aléatoire du résultat ?

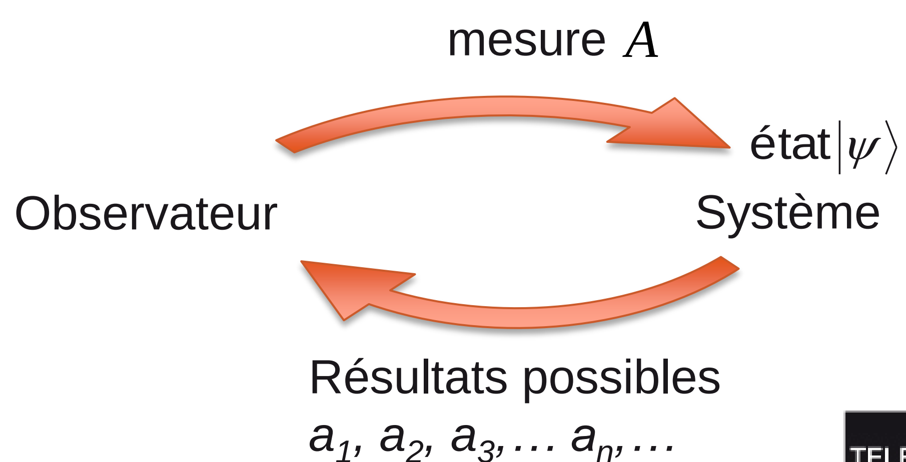


Conceptualiser l'observation expérimentale

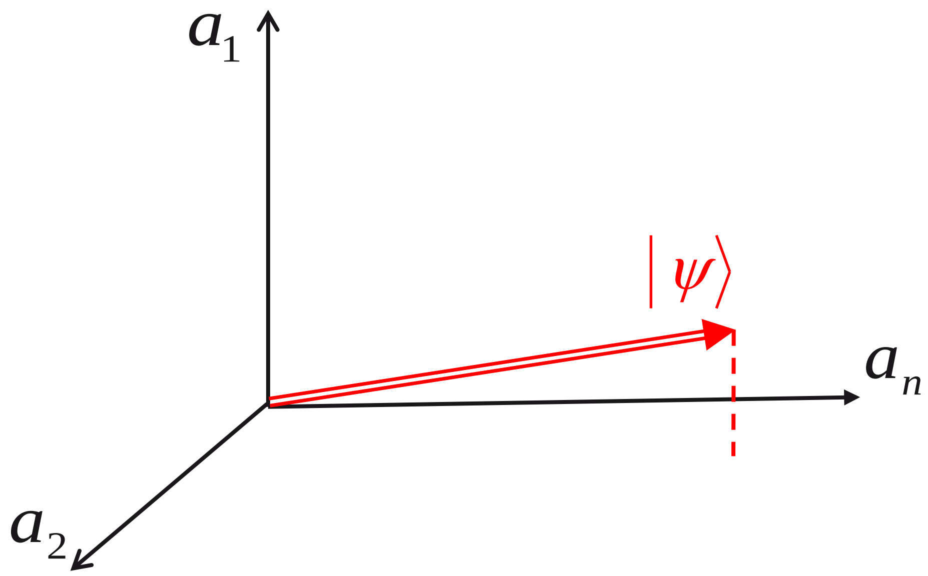
- Question : le système est dans l'état $|\psi\rangle$, on effectue la mesure de A, quelle est la probabilité de trouver comme résultat la valeur propre a_n ?

Mmmm…. Comment trouver ???

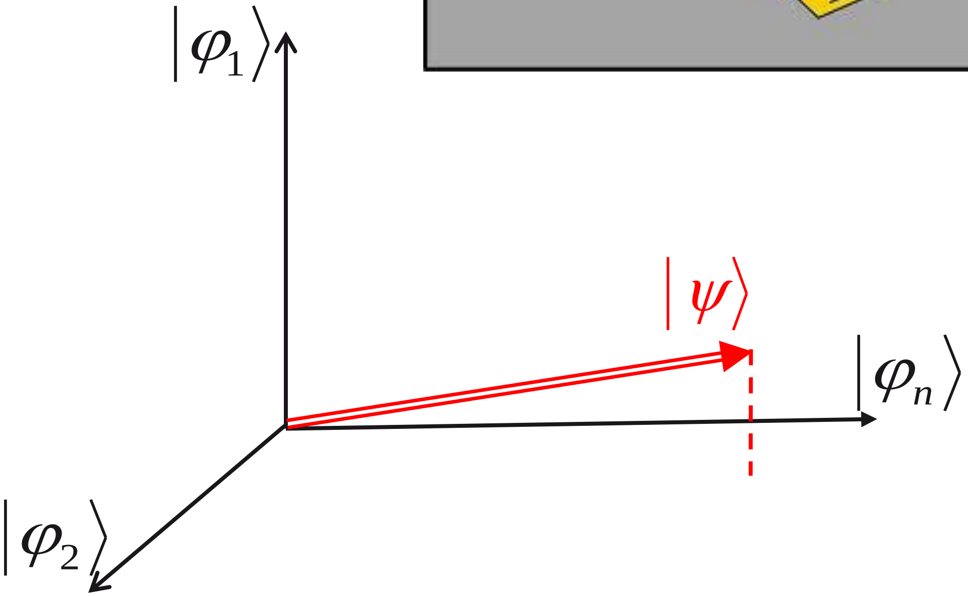
Dans certains cas la probabilité est élevée, c'est sûrement que $|\psi\rangle$ "contient beaucoup a_n". $|\psi\rangle$ est donc dans "la même direction que a_n".



- Conceptualiser l'observation expérimentale
  - C'est quoi la ″direction de a_n″ ?



- Conceptualiser l'observation expérimentale
  - C'est quoi la ″direction de a_n″ ?
  - La direction propre qui lui est associée !



Conceptualiser l’observation expérimentale

- Et maintenant, quid de la probabilité de trouver a_n comme résultat ?

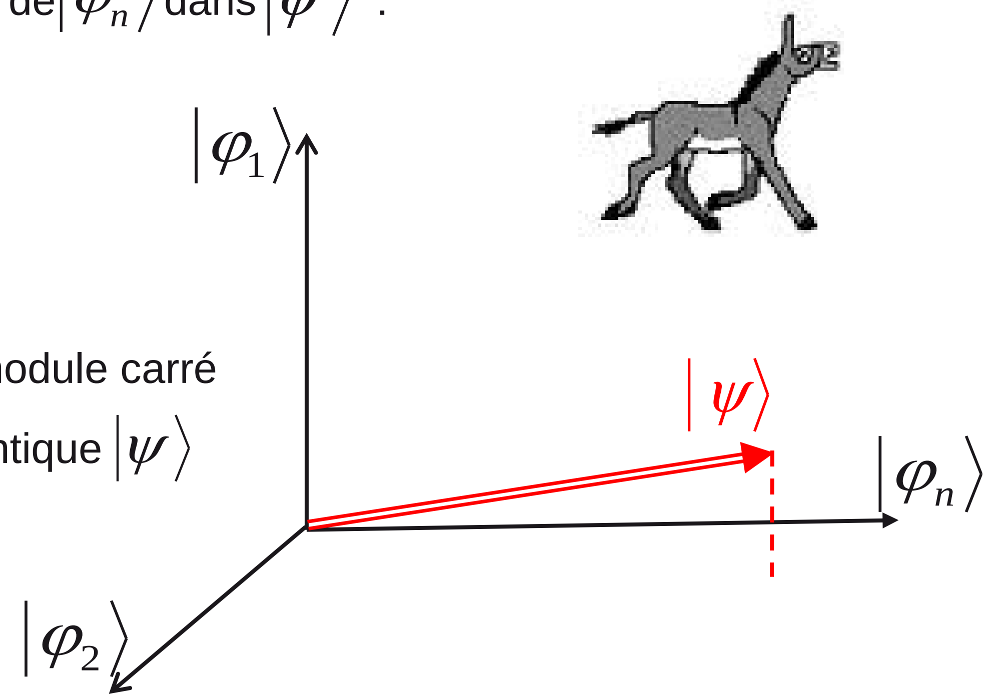
➔ Il faut trouver la "proportion" de $|\varphi_n\rangle$ dans $|\psi\rangle$:

Produit scalaire

$$P(a_n) = \frac{\left|\langle \varphi_n | \psi \rangle\right|^2}{\langle \varphi_n | \varphi_n \rangle \langle \psi | \psi \rangle}$$

Norme^2

$P(a_n)$ n’est rien d’autre que le module carré de la composante de l’état quantique $|\psi\rangle$ sur l’état $|\varphi_n\rangle$! (normalisés)



TELECOM ParisTech

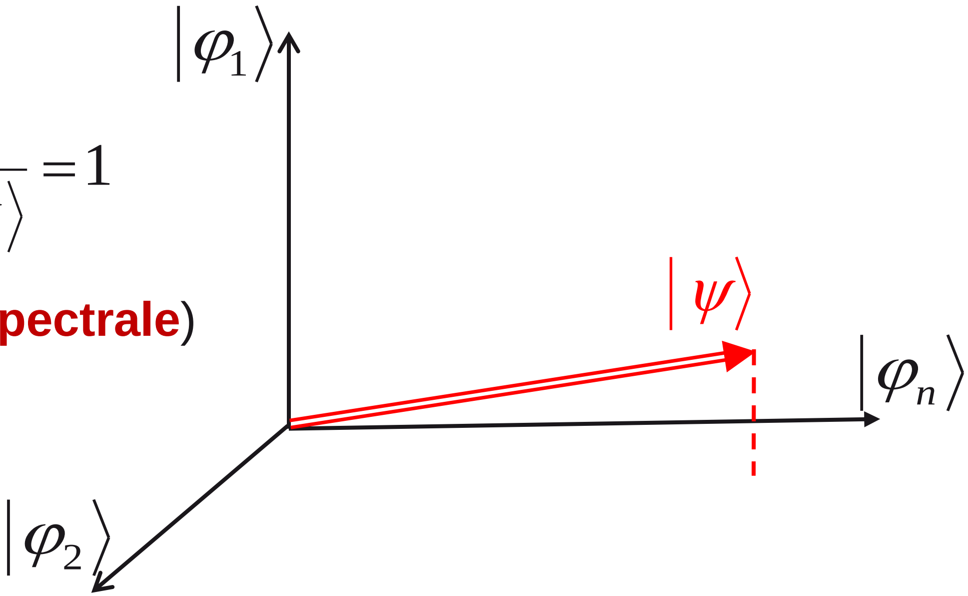
- Conceptualiser l’observation expérimentale
  - Cette belle construction tient-elle la route ?

Il s’agit bien d’une distribution de probabilité :

$$P(a_n) \in [0,1]$$

$$\sum_n P(a_n) = \sum_n \frac{\left|\langle \varphi_n | \psi \rangle\right|^2}{\langle \varphi_n | \varphi_n \rangle \langle \psi | \psi \rangle} = 1$$

(**principe de décomposition spectrale**)

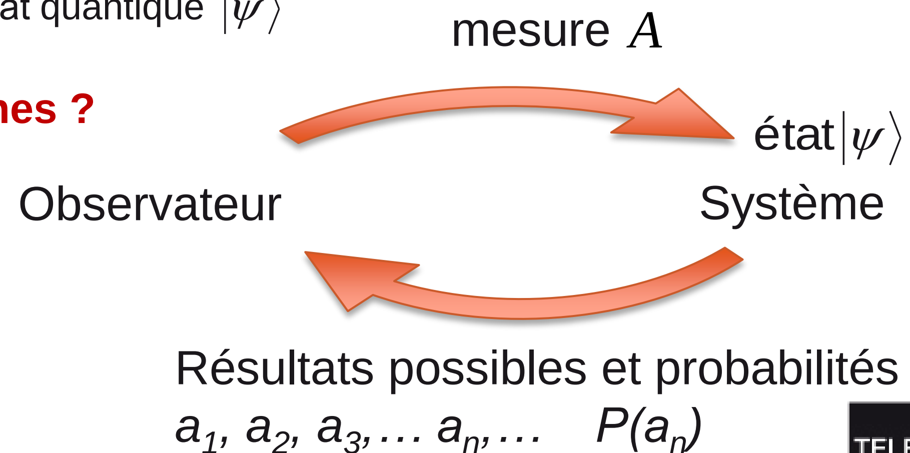


QUESTIONS ?

Conceptualiser l'observation expérimentale

- Résumons :
  - À une grandeur physique *A* on associe un certain opérateur linéaire $\hat{A}$ dont les valeurs propres sont les résultats possibles de la mesure de *A*
  - Cet opérateur agit sur l'état quantique $|\psi\rangle$, représentant l'état physique du système au moment de la mesure, qui appartient à un certain espace vectoriel
  - Le résultat d'une mesure est aléatoire, les probabilités sont complètement déterminées à partir de l'opérateur si on connaît l'état quantique $|\psi\rangle$

Sommes-nous au bout de nos peines ?



Conceptualiser l'observation expérimentale

- La théorie est-elle cohérente ? Quelles conséquences à l'introduction d'un aléa fondamental dans le processus de mesure ?

Gros problème ! Puisque le résultat est aléatoire, à quoi sert la mesure ?

- Mesure de A ➔ résultats possibles a_1, a_2, a_3,… a_n,… avec les probabilités …$P(a_n)$…

- 2e mesure de A ➔ résultats possibles a_1, a_2, a_3,… a_n,… avec les probabilités …$P(a_n)$… ???

Pas très logique…

Conceptualiser l'observation expérimentale

- **Si on mesure la grandeur *A* deux fois de suite (sans attendre), le résultat de la 2e mesure doit être identique au 1er**

➔ Pour la 2e mesure, $P(a_{n0})=1$ si on a trouvé a_{n0} la 1ère fois !

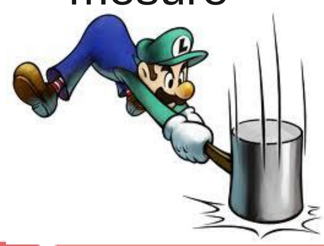
➔ Donc $P(a_n)=0$ si $n \# n0$

➔ Donc $|\psi'\rangle \propto |\varphi_{n0}\rangle$ si $|\psi'\rangle$ est l'état quantique avant la 2e mesure !

➔ Donc l'état quantique après la 1ère mesure n'est pas le même qu'avant !

La mesure a brutalement modifié l'état quantique du système !

mesure

$|\psi\rangle$ ➔  ➔ $|\psi'\rangle$

Conceptualiser l’observation expérimentale

- Peut-on exprimer cela mathématiquement ?

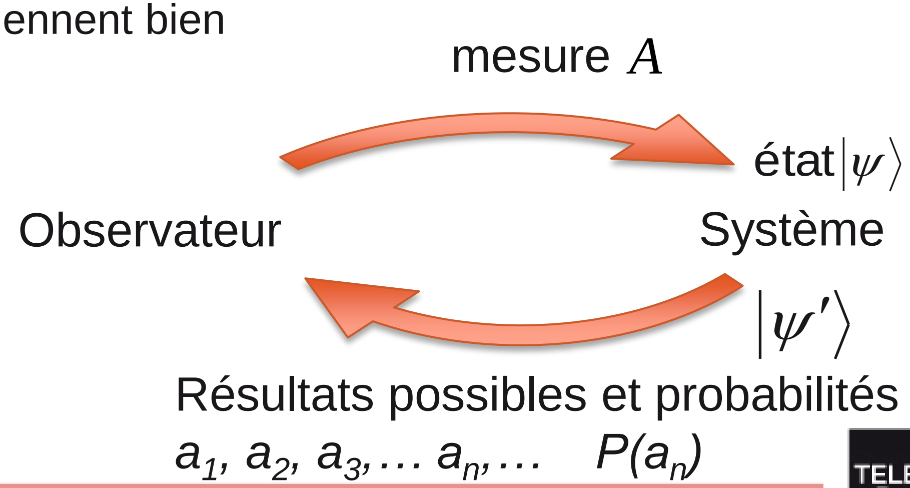
Très simplement : après une mesure ayant donné a_{n0} comme résultat, $\left|\psi'\right\rangle \propto \left|\varphi_{n0}\right\rangle$

$\left|\psi\right\rangle$ a donc été projeté sur la direction $\left|\varphi_{n0}\right\rangle$: $\left|\psi'\right\rangle = \Pi_{n0}\left|\psi\right\rangle$

Remarque : on sait que pour un projecteur : $\Pi_{n0}^2 = \Pi_{n0}$

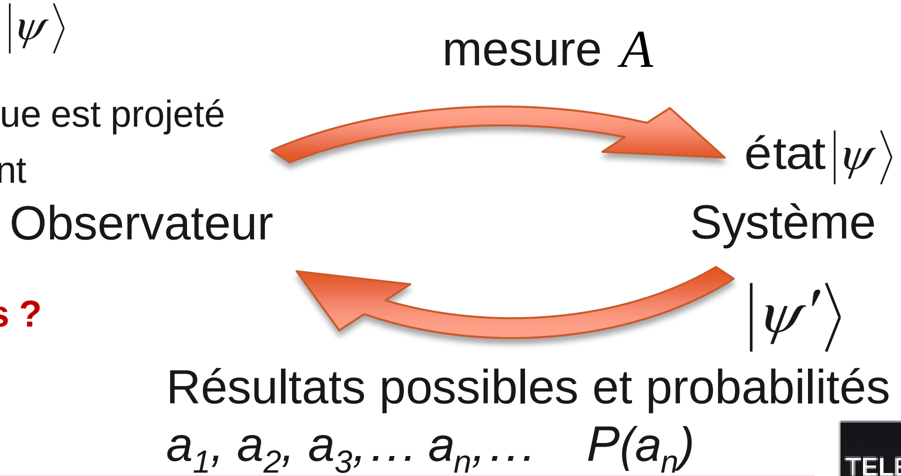
Donc deux mesures successives reviennent bien
à une seule : il n’y a pas de gain
de connaissance supplémentaire

(**principe de réduction du paquet d’ondes**)



■ Conceptualiser l'observation expérimentale

- Résumons :
  - À une grandeur physique *A* on associe un certain opérateur linéaire $\hat{\mathrm{A}}$ dont les valeurs propres sont les résultats possibles de la mesure de *A*
  - Cet opérateur agit sur l'état quantique $|\psi\rangle$, représentant l'état physique du système au moment de la mesure, qui appartient à un certain espace vectoriel
  - Le résultat d'une mesure est aléatoire, les probabilités sont complètement déterminées si on connaît l'opérateur et l'état quantique $|\psi\rangle$
  - A la suite d'une mesure l'état quantique est projeté dans la direction propre correspondant à la valeur propre trouvée



Sommes-nous au bout de nos peines ?

Conceptualiser l’observation expérimentale

- La théorie est-elle cohérente ? On parle de valeurs propres d’opérateur comme résultat de mesure, mais quid si la mesure de la position me donne *3i* ?

Il faut assurer que les valeurs propres sont réelles !

<u>Rappel :</u> en dimension finie, les valeurs propres sont les racines du polynôme caractéristiques (complexes en général)

Y a-t-il une condition pour forcer $\hat{A}$ à avoir des valeurs propres réelles ?

OUI ! Il suffit que l’opérateur soit hermitique (= auto-adjoint)

$$\hat{A} = \hat{A}^{+} \quad \Leftrightarrow \quad \langle \psi | \hat{A} | \varphi \rangle = \langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle^{*} \quad \forall |\psi\rangle, |\varphi\rangle$$

Conceptualiser l'observation expérimentale

- Résumons :
  - À une grandeur physique *A* on associe un certain opérateur linéaire **hermitique diagonalisable** $\hat{A}$ dont les valeurs propres sont les résultats possibles de la mesure de *A*
  - Cet opérateur agit sur l'état quantique $|\psi\rangle$, représentant l'état physique du système au moment de la mesure, qui appartient à un certain espace vectoriel
  - Le résultat d'une mesure est aléatoire, les probabilités sont complètement déterminées si on connaît l'opérateur et l'état quantique $|\psi\rangle$
  - A la suite d'une mesure l'état quantique est projeté dans la direction propre correspondant à la valeur propre trouvée

mesure A

état $|\psi\rangle$

Observateur

Système

$|\psi'\rangle$

Résultats possibles et probabilités

$a_1, a_2, a_3, \ldots a_n, \ldots \quad P(a_n)$

Sommes-nous au bout de nos peines ?

OUI ! (ou presque…)

- **Pour la suite** : quelques **rappels importants** sur les espace hermitiens
  - Puisque $\hat{A}$ est diagonalisable, l'ensemble des états propres forme une base :

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle \varphi_n|\psi\rangle |\varphi_n\rangle$$

Sous réserve que les $|\varphi_n\rangle$ forment une base orthonormée : $\langle \varphi_m|\varphi_n\rangle = \delta_{mn}$

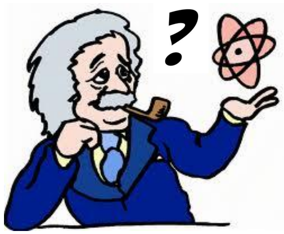
  - L'espace des états quantiques est un espace vectoriel sur **C**. **Le produit scalaire vérifie la symétrie hermitienne** $\langle \varphi|\psi\rangle = \langle \psi|\varphi\rangle^*$
  - L'adjoint $\hat{A}^+$ de l'opérateur $\hat{A}$ vérifie $\langle \psi|\hat{A}^+|\varphi\rangle = \langle \varphi|\hat{A}|\psi\rangle^* \quad \forall |\psi\rangle, |\varphi\rangle$

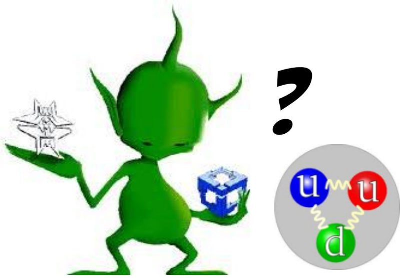
- En mécanique quantique on travaille presque toujours dans des espaces de dimension infinie. Les calculs se font (presque) comme dans des espaces de dimension finie lorsque c'est un **espace de Hilbert**

- Conceptualiser l’observation expérimentale

  - L’ensemble des principes que nous venons de voir constitue une élégante construction théorique, qui paraît abstraite et loin de la nature physique des choses. Comment par exemple décrire le comportement d’une particule avec ces opérateurs ?

➔ **Les opérateurs restent complètement à définir. A chaque nouveau système physique que l’on découvre s’attache la définition de nouveaux opérateurs quantiques.** L’histoire n’est qu’un éternel recommencement…





Il s’agit des **règles de quantification**. Nous en verrons bientôt des exemples

- Conceptualiser l'observation expérimentale

  - Nous avons donc formalisé le processus de mesure, qui décrit la façon dont nous comprenons l'interaction avec le monde physique. Cela suffit-il ?

    Pas complètement : ce processus ne nous dit pas comment le système (i.e. l'état quantique $|\psi\rangle$ évolue **naturellement par ses forces internes**, en l'absence de mesure

➔ **Il faut un postulat d'évolution (cf loi de la dynamique classique)**

Toujours la recherche de simplicité : est-ce que $\frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{K}|\psi\rangle$ pourrait convenir?

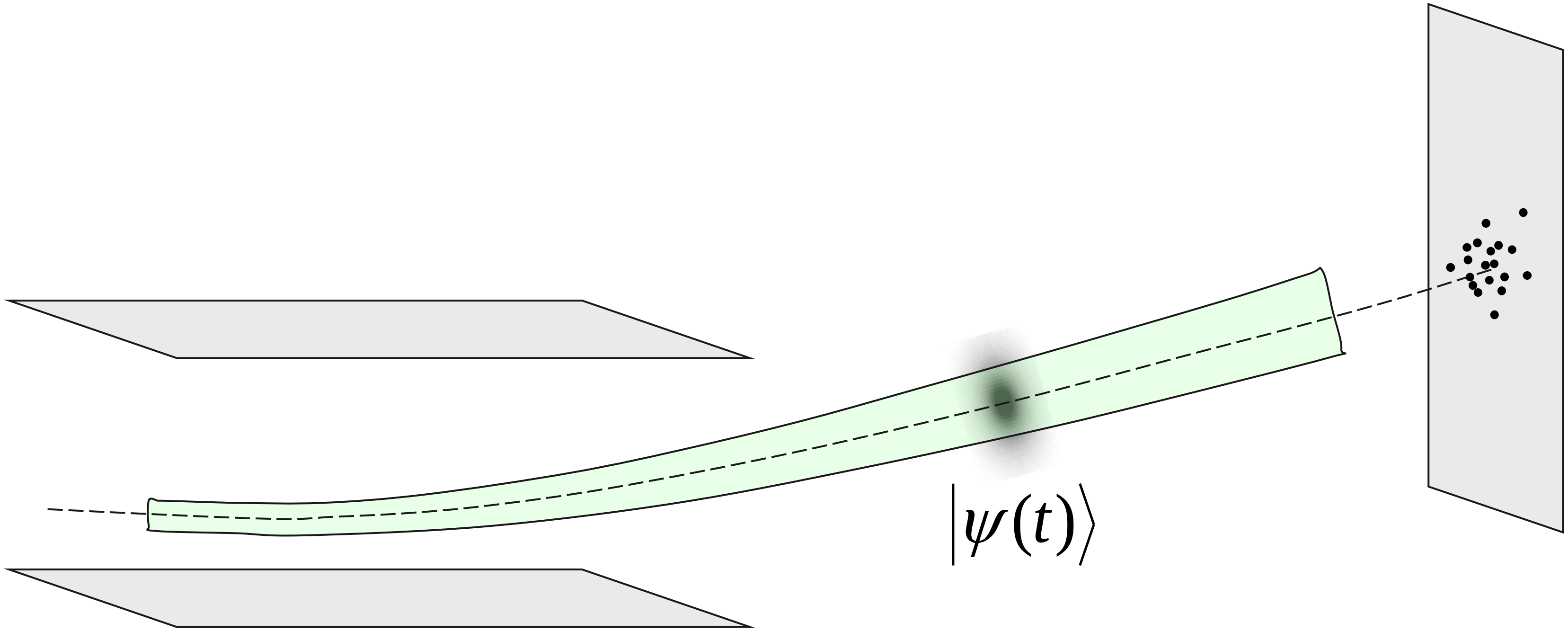
Presque : c'est en fait $i\hbar\frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle$ (**équation de Schrödinger**)

$\hat{H}$ opérateur énergie totale du système $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ avec $\mathrm{h} = 6.62\mathrm{x}10^{-34}\,\mathrm{J.s}$

(l'opérateur **Hamiltonien**)

- Conceptualiser l'observation expérimentale

  - L'équation de Schrödinger permet de décrire l'évolution du « paquet d'onde » au cours du temps, son barycentre suivant la trajectoire classique (**théorème d'Ehrenfest**)



- Conceptualiser l'observation expérimentale

  - Le cas des **états stationnaires** est particulièrement intéressant. Ces états sont les états propres de l'hamiltonien : $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$

$$i\hbar \frac{d|\psi_n\rangle}{dt} = E_n|\psi_n\rangle \qquad \Rightarrow \qquad |\psi_n(t)\rangle = \exp(-iE_n t/\hbar)|\psi_n(0)\rangle$$

Pour les états stationnaires, seule la phase varie, linéairement, au cours du temps. En outre, étant états propres de l'hamiltonien, les valeurs propres associées sont les résultats possibles de la mesure de l'énergie totale.

➔ En mécanique quantique**, l'énergie joue un rôle particulier**

Conceptualiser l'observation expérimentale

- Pour un état stationnaire $\left|\psi_n\right\rangle$, la probabilité d'un résultat de mesure a_m quelconque d'une grandeur quelconque est constante au cours du temps :

$$P(a_m,t)=\frac{\left|\langle\varphi_m|\psi_n(t)\rangle\right|^2}{\langle\varphi_m|\varphi_m\rangle\langle\psi_n(t)|\psi_n(t)\rangle}=\frac{\left|\langle\varphi_m|\exp(-iE_nt/\hbar)|\psi_n(0)\rangle\right|^2}{\langle\varphi_m|\varphi_m\rangle\exp(+iE_nt/\hbar)\exp(-iE_nt/\hbar)\langle\psi_n(0)|\psi_n(0)\rangle}$$

$$P(a_m,t)=\frac{\left|\exp(-iE_nt/\hbar)\langle\varphi_m|\psi_n(0)\rangle\right|^2}{\langle\varphi_m|\varphi_m\rangle\langle\psi_n(0)|\psi_n(0)\rangle}=\frac{\left|\langle\varphi_m|\psi_n(0)\rangle\right|^2}{\langle\varphi_m|\varphi_m\rangle\langle\psi_n(0)|\psi_n(0)\rangle}=P(a_m,0)$$

➔ Le terme « stationnaire » prend tous son sens

- **Les états stationnaires jouent un rôle important en physique quantique** : d'une part ils sont reliés aux résultats possibles de mesure d'énergie du système physique considéré, d'autre part ils constituent une base commode pour le développement d'états réellement dépendant du temps.

"Je crois pouvoir affirmer sans me tromper que personne ne comprend la mécanique quantique"

Richard Feynmann.

Contexte académique } **sans modifications**