

Limites classiques de la mécanique Quantique

C. LONGUEMARE - séminaire d'analyse *

3 juillet 2007

Version 20/05/2007

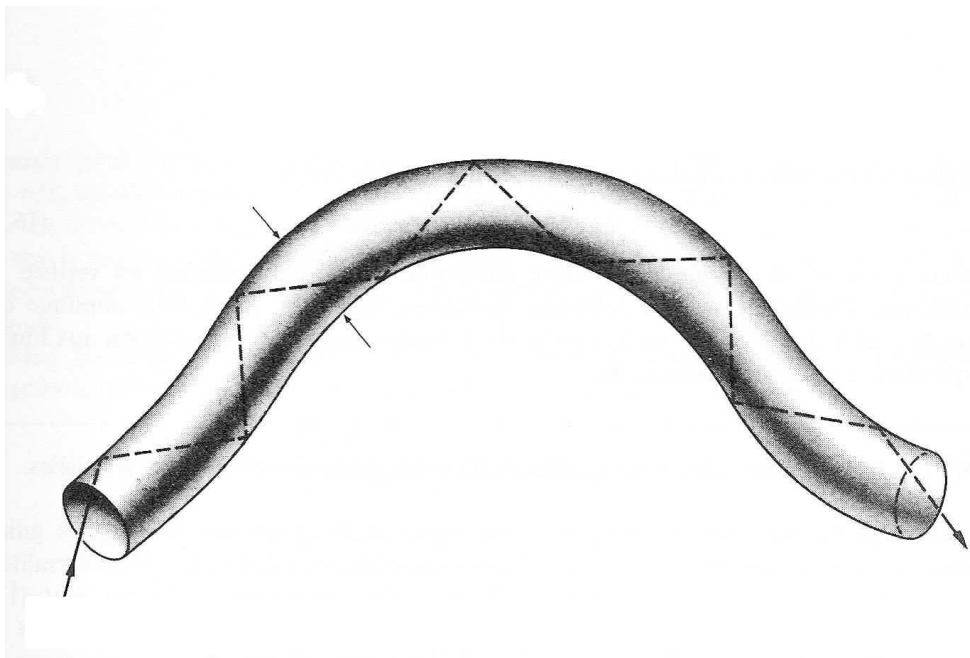


Figure 1: Dans l'approximation classique, la propagation des ondes est confinée par un "guide" qui apparaît comme la trajectoire de l'onde.

Abstract

Ces notes accompagnent un séminaire prévu les 29 mai 2007 au département de mathématiques de l'U-Caen à la demande de Guy Laville.

*UNIVERSITE DE CAEN année 2006-2007

SOMMAIRE

1	Les postulats de la mécanique quantique	4
2	Introduction	5
3	Propriétés de la mécanique quantique	7
3.1	L'onde plane et l'analyse harmonique	7
3.2	Localisation d'une onde quasi-plane	7
3.3	Localisation d'une onde dans un guide	11
4	Equations de Schrödinger et d'Hamilton	12
4.1	Equation de Schrödinger et théorème d'Ehrenfest	12
4.1.1	Une particule dans un potentiel comme exemple	12
4.2	Equations de Hamilton et les crochets de Poisson	13
4.2.1	Une particule dans un potentiel comme exemple	13
5	Les approximations semiclassiques	14
5.1	Eikonale dans un champ extérieur	14
5.2	La quantification semi classique de Bohr-Sommerfeld	16
5.2.1	Mouvement d'un électron dans le champ électrique du noyau atomique	16
5.2.2	Juste pour faire mention de l'effet tunnel références [4], 212	16
5.3	WKB et la notion d'indice	17
5.3.1	développement en puissance de $\hbar$	17
5.3.2	l'indice n	17
6	Conclusion	18
7	ANNEXES	20
7.1	Spectre du laplacien dans un espace borné	20
7.1.1	Les valeurs propres de $-\Delta$ sont positives	20
7.1.2	Exemple de valeurs propres k discrètes	21
7.1.3	Le courant d'énergie associé à une onde classique ?	21
7.1.4	Le courant associé à une onde quantique non relativiste ?	22
7.1.5	Les valeurs propres k sont discrètes : cas général ?	22

List of Figures

1	Dans l'approximation classique, la propagation des ondes est confinée par un "guide" qui apparaît comme la trajectoire de l'onde	1
2	Diffraction de la lumière	8
3	Diffraction X	9
4	Diffraction des électrons	10
5	Guide d'onde	11
6	Diffusion de particules par le potentiel répulsif ou attractif dans l'approximation Eikonale	15
7	Conditions pour un comportement classique références [1],138	18

1 Les postulats de la mécanique quantique

The Postulates of Quantum Mechanics

1. Associated with any particle moving in a conservative field of force is a wave function which determines everything that can be known about the system
2. With every physical observable q there is associated an operator Q , which when operating upon the wavefunction associated with a definite value of that observable will yield that value times the wavefunction
3. Any operator Q associated with a physically measurable property q will be Hermitian.
4. The set of eigenfunctions of operator Q will form a complete set of linearly independent functions.
5. For a system described by a given wavefunction, the expectation value of any property q can be found by performing the expectation value integral with respect to that wavefunction.
6. The time evolution of the wavefunction is given by the time dependent Schrodinger equation.

2 Introduction

Rappelons les éléments de la mécanique quantique tels qu'ils ont été formulés par les physiciens dans les années 1920-1930.

- Les particules (atomes) sont associés à des ondes ou fonctions d'ondes, plus généralement à des éléments (vecteurs) d'un espace de Hilbert sur $\mathcal{C}$.

$$\psi(X) \text{ avec } X : (x_0 = ct, x_i) \quad (1)$$

- La mesure g d'un observable G (opérateur hermitien) est associée à l'amplitude de l'état propre de valeur propre g dans l'état physique ψ du système. Cette amplitude est le produit scalaire de ces deux états

$$\mathcal{A} = \langle \psi_g | \psi \rangle = (\psi_g, \psi) \in \mathcal{C}$$

Remarque $\langle \psi_g |$ est l'espace dual de l'espace des $|\psi\rangle$

- La probabilité d'une mesure g de G est le module carré de cette amplitude $\mathcal{A}$:

$$Prob(g) = |\mathcal{A}|^2$$

La moyenne des mesures G est donnée par :

$$\langle g \rangle = \langle \psi | G | \psi \rangle = (\psi, G\psi) = \sum g |\mathcal{A}|^2$$

Une mesure de G est donc toujours une valeur propre de G d'où l'importance de la détermination du spectre de G (exemple $G \equiv H$).

- Comme pour les ondes classiques, l'"onde" ψ n'est pas localisée, il n'y a donc pas de trajectoire mais un principe d'incertitude. Celui-ci implique **l'indiscernabilité** des particules identiques.
- Les relations entre grandeurs classiques et quantiques sont liées à la constante de Planck et la loi de De Broglie

$$\begin{aligned} E &= \hbar\omega & \text{avec } \omega &= 2\pi \times \nu \\ p &= \hbar k & \text{avec } k &= 2\pi \times \lambda^{-1} \end{aligned} \quad (2)$$

ν , λ sont respectivement la fréquence et la longueur d'onde quantique tandis que E , p sont respectivement l'énergie et la quantité de mouvement de la particule.

- La continuité classique se retrouve à la limite $\hbar \rightarrow 0$ soit quand :

$$\nu \rightarrow \infty \quad \text{et } \lambda \rightarrow 0$$

- La dynamique des ondes quantiques peut être construite sur des bases lagrangiennes ou hamiltoniennes ou bien sur une équation différentielle l'équation de Schrödinger :

$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$

- La connaissance de ψ établit tout ce qu'il est possible de savoir sur le système par les mesures physiques.

Rappelons les éléments de la mécanique classique.

- L'élément fondamental de la mécanique classique est le point matériel de masse m ; son état physique est déterminé par une position dans l'espace et une vitesse.

$$(q, \dot{q} = \frac{dq}{dt}) \quad q \equiv x \quad (3)$$

- La mesure g d'un observable $G(q, \dot{q})$ est déterminée par la mesure de l'état du système dans son espace de phase $(q, \dot{q})$.

Exemple

$$L = m\dot{x} \wedge \dot{x}$$

- La détermination d'une mesure g de G n'est limitée que par la qualité des instruments. Les valeurs possibles sont continues.
- L'état classique $(q, \dot{q})$ est localisé, il y a par principe une trajectoire et donc, même les particules identiques se distinguent finalement par leur trajectoire. Les particules identiques sont discernables.
- La dynamique classique peut être construite
 - sur des bases lagrangiennes avec le principe de moindre action

$$\mathcal{A} = \int_{A,B} L(q, \dot{q}) dt \quad \text{minimum}$$

- ou hamiltoniennes

$$\begin{pmatrix} \dot{q} \\ \dot{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +\frac{\partial H}{\partial p} \\ -\frac{\partial H}{\partial q} \end{pmatrix}$$

- ou sur l'équation de Newton

$$\boxed{\frac{\partial p}{\partial t} = F = -\frac{\partial H}{\partial q} = \frac{\partial L}{\partial q}}$$

- ou sur les équations d'Hamilton-Jacobi tirées de l'action .

$$d\mathcal{A} = L dt = -H dt + p dq$$

- La connaissance de la trajectoire en fonction du temps détermine tout ce qu'il est possible de savoir sur le système par les mesures physiques.

3 Propriétés de la mécanique quantique

3.1 L'onde plane et l'analyse harmonique

Considérons l'état quantique d'une particule masse m tel qu'il soit invariant par translation de l'espace. Construisons l'opérateur de translation dans l'espace des fonctions d'onde.

$$\psi(x) \rightarrow \psi(x-a) = \exp\left[-a \frac{\partial}{\partial x}\right] \psi(x)$$

Le générateur des translations est donc

$$\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{p}{\hbar} \quad \text{ou} \quad p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{ou} \quad [p, x] = \frac{\hbar}{i}$$

Une particule en déplacement libre dans l'espace avec une impulsion p_0 se trouve dans un état invariant par translation puisqu'au cours du temps la particule reste dans le même état, à une translation près. C'est une onde propre de l'opérateur p avec la valeur propre p_0

$$\psi(x) \sim \exp\left\{+i \frac{p_0 x}{\hbar}\right\} \quad \text{avec} \quad \lambda = \frac{\hbar}{p_0}$$

En fonction du temps :

$$\psi(X) \sim \exp\left(+i \left\{ \frac{-E_0 t + p_0 x}{\hbar} \right\}\right)$$

Soit

$$\psi(X) \sim \exp\left(+i \{-\omega_0 t + k_0 x\}\right)$$

L'évolution au cours du temps équivaut à une translation ; la fonction d'onde ainsi construite est indéfinie dans l'espace et dans le temps.

3.2 Localisation d'une onde quasi-plane

Considérons une fonction d'onde localisée telle que

$$\psi(x) = A(x) \exp i\phi(x)$$

Si A varie lentement et n'est différente de zéro que dans un domaine fini, si de plus ϕ varie grandement dans ce domaine avec une variation quasi-linéaire on pourra écrire l'onde comme le produit d'une enveloppe et d'une onde porteuse :

$$\psi(x) = A(x) \exp(i k_0 x)$$

Dans l'espace-temps avec $X = (t, x)$ on aura :

$$\psi(X) = A(X) \exp i\phi(X) = A(X) \exp i(-\omega_0 t + k_0 x)$$

Remarque références [3], 175

$\phi(X)$ est appelée solution Eikonale ; on aura localement les caractéristiques de l'onde :

$$\omega = -\frac{\partial \phi}{\partial t} \quad \text{et} \quad k = \frac{\partial \phi}{\partial x}$$

Supposons que l'état de l'onde en X résulte d'une somme sur différents chemins

$$\psi(X) = \int_{\text{chemins}} A(X) \exp i\phi(X)$$

On peut envisager deux cas extrêmes d'interférences

$$\text{constructives } \psi(X) = \exp i\phi(X) \int_{\text{chemins}} A(X)$$

$$\text{si } \delta\phi(X)_{\text{chemins}} = 0, 2\pi, \dots 2\pi p$$

$$\text{destructives } \psi(X) = A(X) \int_{\text{chemins}} \exp(i\phi(X)) \sim 0$$

$$\text{si } \delta\phi(X)_{\text{chemins}} \text{ varie sur } [0, 2\pi]$$

Conséquences

- Principe de Fermat pour les rayons lumineux monochromatiques (optique géométrique)

$$k_0 \int n dl \text{ stationnaire sur la trajectoire de la lumière}$$

Remarque Le principe de Fermat est l'équivalent en optique du principe de Maupertuis qui affirme que pour un système d'énergie fixée la trajectoire est celle qui minimise l'action réduite

$$S_0 = \int p dq = \int |p| dl$$

Exemple références [2], 192

$$E = \frac{m}{2} \dot{q}^2 + V(q) \Rightarrow S_0 = \int \sqrt{2m(E - V(q))} dl$$

S_0 est minimum sur la trajectoire physique

586

Diffraction

(17.3)

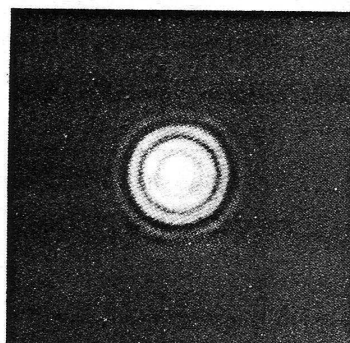


Fig. 17-12. Figure de diffraction de Fraunhofer d'une ouverture circulaire.

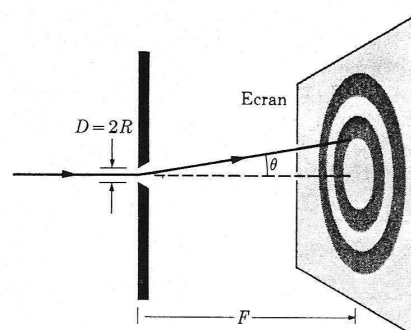


Fig. 17-13

Second ordre Premier ordre

Figure 2: Diffraction de la lumière

17.8)

Diffusion des Rayons X par les Cristaux

605

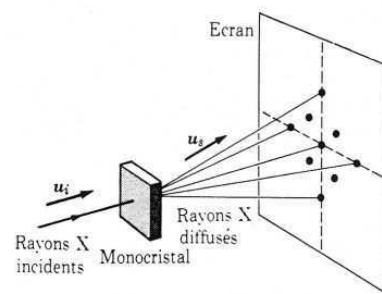


Fig. 17-36. Diffraction de Laue des rayons X par un monocristal.



Fig. 17-37. Diagramme de diffraction de Laue d'un cristal de quartz. On a essayé de masquer l'effet du faisceau direct.

Figure 3: Diffraction X

- Dans l'approximation classique, la phase des ondes quantiques sera égale à l'action divisée par $\hbar$.

$$\phi(X) \sim \frac{\mathcal{A}(X)}{\hbar} \rightarrow \infty \text{ si } \hbar \rightarrow 0$$

Application Numérique : $J.s/\hbar \sim 10^{34}$

- A l'approximation classique, $\hbar$ tend vers 0, alors la phase est infinie mais stable par rapport aux variations des chemins possibles.

$$\text{si } \hbar \rightarrow 0 \quad \phi(X) \rightarrow \infty \text{ mais } \delta\phi(X) \sim 0$$

:

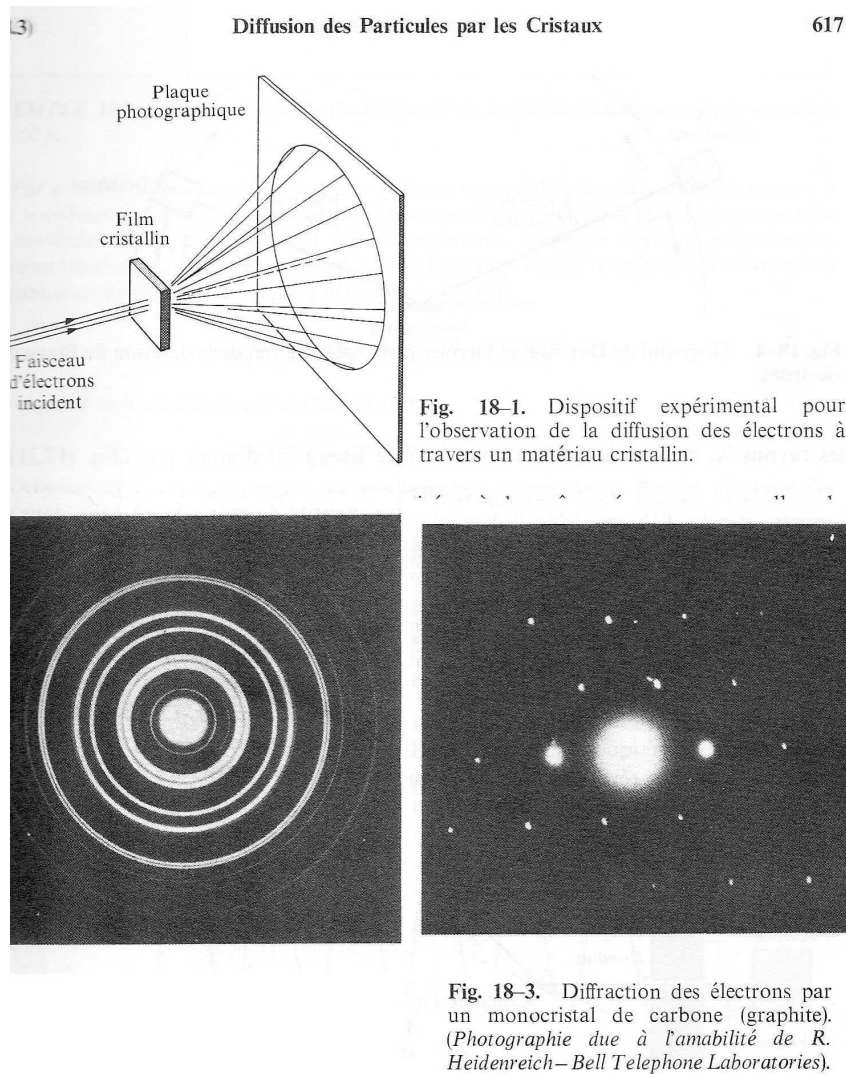


Figure 4: Diffraction des électrons

3.3 Localisation d'une onde dans un guide

Définition d'un guide d'onde :

C'est une structure tubulaire indéfinie dans une direction qui limite un milieu susceptible de transporter de l'énergie d'une onde. Il existe de nombreux exemples . Un guide a les propriétés d'une trajectoire classique puisque l'énergie se propage à une dimension selon la géométrie du guide.

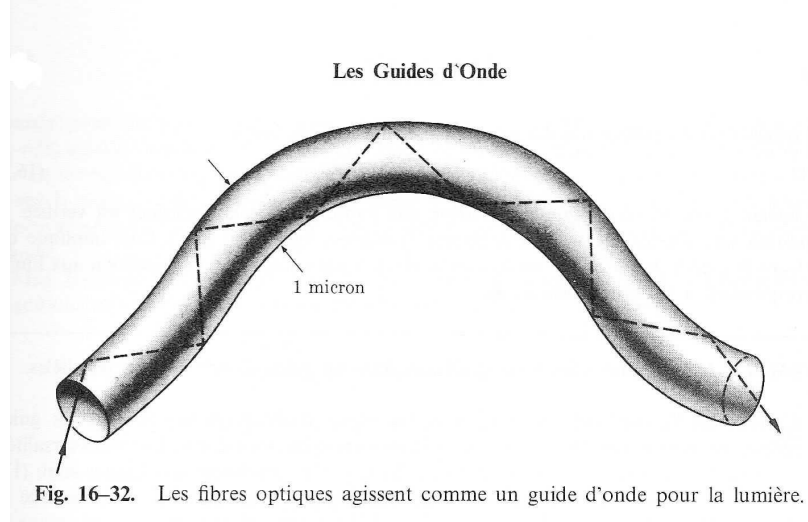


Figure 5: Guide d'onde

Supposons une équation d'onde de D'Alembert (par exemple pour l'électromagnétisme) :

$$\square A(X) = \left\{ \sum_{i=1,3} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right\} A(X) = 0$$

Recherchons des solutions qui pourraient correspondre à une propagation à une dimension selon Oz à l'intérieur du guide. Considérons des champs $A(X)$ de la forme :

$$A(X) \sim \exp i(-\omega t + k z) a(x, y)$$

Cette solution se propage comme une onde plane selon Oz mais elle est limitée par les "paroi" du guide. Dans ces conditions, la solution réduite à deux dimensions vérifie une équation stationnaire

$$-\sum_{i=1,2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} a(x, y) = -\Delta a(x, y) = \left(-k^2 + \frac{\omega^2}{c^2}\right) a(x, y)$$

à laquelle il faut adjoindre des contraintes physiques sur les bords, celles-ci conduisent à des valeurs propres discrètes positives de l'opérateur $-\Delta$ (démonstration Annexe 1):

$$\frac{\omega^2}{c^2} = k^2 + k_n^2 \text{ avec } n = 1, 2, \dots$$

Remarque La propagation de l'onde selon Oz est "entravée" par les limites transversales du guide et l'onde devient inerte. Le terme k_n^2 est un terme d'inertie qu'on pourrait noter $(mc/\hbar)^2$ (voir figure 5)

4 Equations de Schrödinger et d'Hamilton

4.1 Equation de Schrödinger et théorème d'Ehrenfest

Soit l'équation de Schrödinger agissant sur un état ψ

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (4)$$

ou H est l'opérateur de Hamilton du système qui agit dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$ des états physiques (H est abstrait).

Soit une grandeur mesurable (observable physique) G , c'est un opérateur hermitien à valeurs propres réelles g . A l'instant t , La moyenne des mesures est, par principe de la MQ,

$$\bar{g} = \langle G \rangle = \langle \psi | G | \psi \rangle = (\psi, G\psi)$$

L'évolution de cette moyenne au cours du temps est évidente, c'est le théorème d'Ehrenfest :

$$\frac{d}{dt} \bar{g} = -\frac{i}{\hbar} \langle \psi | [G, H] | \psi \rangle \quad (5)$$

Les Constantes du mouvement G sont telles que

$$[G, H] = 0$$

Cas particulier : Si ψ est état propre de H un tel état est dit stationnaire

- alors une mesure de l'énergie donne la valeur propre de H et la qualité de la mesure n'est limitée que par l'instrumentation (en principe)
- quelle que soit G la moyenne est stationnaire

$$\forall G \quad \frac{d}{dt} \bar{g} = 0$$

- Si G commute avec H

$$\forall \psi \quad \frac{d}{dt} \bar{g} = 0$$

4.1.1 Une particule dans un potentiel comme exemple

alors on a

$$\psi(t, x) \quad H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

Considérons $G \equiv p$ et construisons le commutateur de p avec H

$$[p, H] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x} = -\frac{\hbar}{i} F(x)$$

Si la force $F(x)$ varie lentement sur l'extension du paquet d'onde $\psi(t, x)$ alors le comportement de la moyenne des mesures sera classique puisque :

$$\frac{d\bar{p}}{dt} = \bar{F} \sim F(\bar{x}) \quad \frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{\bar{p}}{m} \quad (6)$$

Pour que l'on soit dans le régime classique, il faut que la variation des interactions soit faible sur l'extension δx du paquet d'onde et plus faible encore sur une distance de l'ordre de la longueur d'onde $\lambda = \frac{h}{p}$. C'est le cas chaque fois qu'une particule interagit avec un instrument macroscopique (accélérateur...) ce n'est pas le cas quand elle interagit avec par exemple un champ électrique atomique.

4.2 Equations de Hamilton et les crochets de Poisson

L'état du système classique est représenté par un point dans l'espace de phase (q, p) et sa dynamique est celle des équations d'Hamilton

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_p \\ -H_q \end{pmatrix} \quad \text{où } H_q = \frac{\partial H}{\partial q} \quad H_p = \frac{\partial H}{\partial p}$$

Considérons une grandeur classique $g = G(q, p)$ à l'instant t et observons son évolution dans le temps. En introduisant les crochets de Poisson on aura évidemment

$$\frac{d}{dt} g = (G_q H_p - G_p H_q) = \{G, H\} \text{ ou } F_q = \frac{\partial F}{\partial q} \quad F_p = \frac{\partial F}{\partial p} \quad (7)$$

Les Constantes du mouvement G sont telles que

$$\{G, H\} = 0$$

Le passage du classique au quantique s'effectue formellement en remplaçant

$$\{G, H\} \rightarrow -\frac{i}{\hbar} [G, H]$$

et en prenant les moyennes des mesures dans le cas quantique.

Exemple

$$\{p, q\} = -1 \rightarrow [p, q] = \frac{i}{\hbar}$$

L'algèbre des crochets de Poisson est une algèbre de Lie...

Cas particulier : Si (q, p) est un état d'équilibre dans l'espace de phase

- quelle que soit G la mesure est stationnaire il est donc nécessaire que localement H vérifie

$$H_p = 0 \quad \text{et} \quad H_q = 0$$

ce sont les conditions d'équilibre en mécanique.

Exemple

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2$$

4.2.1 Une particule dans un potentiel comme exemple

alors on a

$$(q, p) \equiv (x, p) \quad H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad p = m\dot{x}$$

Considérons $G \equiv p$ et construisons le crochet de Poisson de p avec H

$$\{p, H\} = (-G_p H_q) = F(x)$$

Où $F(x)$ est la force agissant sur le point matériel; le comportement dynamique sera tel que :

$$\frac{dp}{dt} = F(x) \quad \frac{dx}{dt} = (G_q H_p) = \frac{\bar{p}}{m} \quad (8)$$

5 Les approximations semiclassiques

5.1 Eikonale dans un champ extérieur

Retour sur l'approximation eikonale **références** [3], 175

Soit une fonction d'onde semi-classique de la forme

$$\psi \sim a(X) \exp(i\phi(X)) \text{ avec } \phi(X) \gg 1 \text{ et } \frac{\partial a}{\partial X} \sim 0$$

Soit une d'onde stationnaire

$$\phi(X) = -\omega t + \phi(x)$$

L'équation de Schrödinger se transforme en équation de l'eikonale :

$$2m (E - V(x)) \psi = -\hbar^2 \Delta \psi$$

$$\Rightarrow (\hbar \vec{\text{grad}} \phi)^2 = 2m (E - V(x))$$

Remarque

- $p(x) = \sqrt{2m (E - V(x))}$ est le module de la quantité de mouvement classique.
- A partir de conditions initiales, la trajectoire classique est déterminée par la stabilité de l'action:

$$\int p(x) ds \text{ stable entre deux points de la trajectoire}$$

- la propagation de l'onde sera telle que la phase sera stable entre surface d'onde $\phi = cte$

$$\int d\phi(x) \text{ stable entre surfaces d'onde}$$

- le domaine $p(x) \in \mathcal{R}$ est identique au domaine classique $E - V(x) > 0$
- si $V(x)$ est négatif(positif) le potentiel est attractif(répulsif) et la vitesse de phase est plus faible (plus grande) (voir figure 6).

$$v_\phi = \frac{\omega}{|\vec{\text{grad}}(\phi)|} = \frac{E}{\sqrt{2m (E - V(x))}}$$

- Le domaine non-classique $E < V(x)$ induit des valeurs de p imaginaires que l'on interprète physiquement comme une atténuation de l'onde : le milieu devient opaque au sens optique du terme.

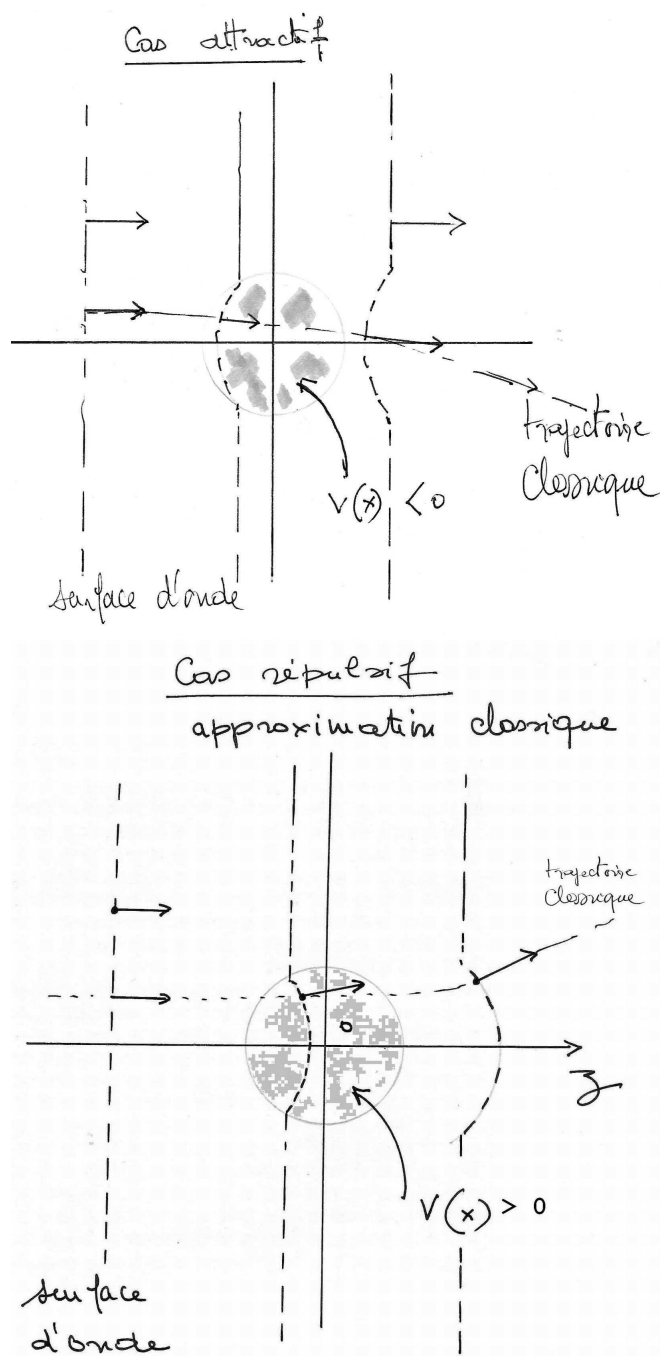


Figure 6: Diffusion de particules par le potentiel répulsif ou attractif dans l'approximation Eikonale

5.2 La quantification semi classique de Bohr-Sommerfeld

La quantification semi-classique de Bohr-Sommerfeld a été une tentative historique pour concilier la physique classique avec l'évidence expérimentale du caractère discret des états atomiques. C'est une condition qui devait permettre de discriminer parmi les trajectoires classiques celles qui étaient physiques c'est à dire observables. L'analogie avec la stabilité de certains mouvements planétaires autour du soleil est parfois évoquée comme justification macroscopique. Evidemment ce critère de quantification n'a qu'une valeur historique aujourd'hui.

5.2.1 Mouvement d'un électron dans le champ électrique du noyau atomique

Le potentiel est coulombien :

$$V(x) = - Z\hbar c \frac{\alpha}{r} \quad \text{avec } r = |\vec{x}|$$

La différence de phase entre deux points d'une trajectoire classique peut être estimée dans le cadre de l'approximation eikonale.

$$\Delta\phi = \phi(B) - \phi(A) = \hbar^{-1} \int_{AB} p \, ds$$

Si la trajectoire est périodique et la phase bien définie, il faut

$$\Delta\phi = \hbar^{-1} \int_{A \rightarrow A} p \, ds = n \, 2\pi$$

Considérons le cas des trajectoires circulaires pour simplifier

$$p(r)^2 = 2m (E - V(r)) \tag{9}$$

$$p(r) \, 2\pi r = n \, 2\pi \hbar \tag{10}$$

$$E = V/2 = -T \quad \text{avec } T = \frac{p^2}{2m} \tag{11}$$

$$\text{théorème du virielpour les cercles} \tag{12}$$

Il résulte de ces hypothèses les valeurs de l'énergie des états physiques semi-classiques de l'électron atomique (trajectoires circulaires)

$$p = Z\alpha \frac{mc}{n} \Rightarrow E = -\frac{(Z\alpha)^2 mc^2}{2n^2}$$

Remarque Application numérique pour l'hydrogène ($Z = 1$)

$$mc^2 = 511keV \quad \alpha = (137)^{-1} \Rightarrow E = -\frac{13,6}{n^2} eV$$

5.2.2 Juste pour faire mention de l'effet tunnel références [4], 212

Dans le cas où $V(x) > E$ sur l'intervalle $[A, B]$, l'amplitude de l'onde s'atténue exponentiellement et la probabilité de traverser une barrière de potentiel par effet tunnel est

$$D = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{AB} \sqrt{2m (V(x) - E)} \, ds\right)$$

5.3 WKB et la notion d'indice

5.3.1 développement en puissance de $\hbar$

Reprenons l'équation de Schrödinger stationnaire dans un potentiel comme modèle

$$-\hbar^2 \Delta \psi(x) = 2m(E - V(x))\psi(x)$$

Développons la solution en puissance de $\hbar$

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\sigma_0(x) + \sigma_1(x) \dots)\right)$$

Les équations à l'ordre 0 et 1 en $\hbar$ sont :

$$|\vec{grad} \sigma_0(x)| = p(x) = \pm \sqrt{2m(E - V(x))} \quad (13)$$

$$\sum_x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2 \sigma_0}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial \sigma_0}{\partial x} \frac{\partial \sigma_1}{\partial x} = 0 \quad (14)$$

A une dimension, par exemple on trouve

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} \sigma_0\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right) \quad \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sigma_1(x)\right) \sim \frac{1}{\sqrt{p(x)}}$$

Remarque les points de rebroussement où $p = 0$ sont singuliers pour cette solution comme en physique classique .

5.3.2 l'indice n

A haute énergie, la trajectoire est rectiligne donc la diffusion n'apparaît pas mais l'onde subit encore un déphasage à la rencontre du potentiel. Par analogie avec l'optique, on peut introduire ce déphasage au moyen d'un indice qui est le rapport de la vitesse de phase sans avec ou l'interaction .

$$n(x) = \frac{\sqrt{2m(E - V(x))}}{\sqrt{2mE}} = \sqrt{1 - \frac{V(x)}{E}} \quad (15)$$

$$\Delta \phi = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \int n(x) dx \quad (16)$$

6 Conclusion

Les circonstances favorisant la satisfaction simultanée de ces deux inégalités sont: 1) une grande énergie cinétique $\bar{T}$ de la particule, 2) un champ $U(x)$ variant lentement en fonction des coordonnées x .

Nous aboutissons ainsi au résultat suivant: *la transition des équations de mouvement quantiques aux équations de Newton se manifeste lorsqu'on passe à de grandes énergies cinétiques des particules et à des champs dont l'intensité varie lentement.*

Figure 7: Conditions pour un comportement classique références [1], 138

References

- [1] D. Blokhintsev. *{ Principes de mécanique quantique }*. MIR , Inc., 1976.
- [2] L. Landau & E. Lifchitz. *{ Mécanique }*. MIR , Inc., 1969.
- [3] L. Landau & E. Lifchitz. *{ Théorie des champs }*. MIR , Inc., 1970.
- [4] L. Landau & E. Lifchitz. *{ Mécanique quantique }*. MIR , Inc., 1972.

7 ANNEXES

7.1 Spectre du laplacien dans un espace borné

On pose

$$a(x, t) = \exp(-i\omega t) a(x) \text{ avec } x \equiv (x, y, \dots)$$

Soit à démontrer que la solution réduite d'une équation d'onde stationnaire $a(x) \in \mathcal{C}$ telle que l'équation 17 à laquelle sont imposées sur les bords des contraintes physiques

1. admet des valeurs propres positives
2. et discrètes

Exemple à 2 dimensions ! $x \equiv (x, y)$

$$-\sum_{i=1,2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} a(x, t) = -c^{-2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} a(x, t) = -\Delta a(x) = k^2 a(x, t) \quad (17)$$

Les contraintes physiques sont par exemple l'annulation du champs sur les bords du domaine

$$a(x) = 0 \text{ si } x \in \text{bord}$$

Un courant $\vec{j}(x)$ peut être associé à l'onde et le flux à travers les bords sera nul :

$$\vec{j}(x) \sim a(x)^* \vec{\nabla} a(x) \Rightarrow j(x) = 0 \text{ pour } x \in \text{bord} \Rightarrow \vec{j} \cdot (\vec{n} \wedge d\vec{l}) = 0$$

avec à 2D par exemple :

$$\vec{n} \wedge d\vec{l} = (-dy, dx)$$

Sur les bords du guide on aura évidemment :

$$\text{flux de } j = \int \left(a(x)^* \vec{\nabla} a(x) \right) \vec{n} \wedge d\vec{l} = 0$$

7.1.1 Les valeurs propres de $-\Delta$ sont positives

Il vient ensuite l'équation suivante , par application du théorème de Stokes

$$0 = \int \vec{\nabla} \cdot \left(a(x)^* \vec{\nabla} a(x) \right) ds = \int |\vec{\nabla} a(x)|^2 ds + \int a(x)^* \Delta a(x) ds \quad (18)$$

Soit explicitement

$$\int |\vec{\nabla} a(x)|^2 ds = \int a(x)^* (-\Delta) a(x) ds = k^2 \int a(x)^* a(x) ds \geq 0$$

Les valeurs propres de $(-\Delta)$ sont donc positives avec .

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$$

Remarque A noter, une conséquence physique importante pour le filtrage en fréquence : le guide est un filtre passe-haut tel que

$$\forall \omega \quad \omega \geq \min(k c)$$

7.1.2 Exemple de valeurs propres k discrètes

quantification sur un segment ou dans un rectangle

- 1D : le segment sur Ox est limité à $[0, a]$
La solution pour le champ $a(x)$

$$a(x) = A \exp(+ikx) + B \exp(-ikx)$$

La condition les bords

$$a(x)_{x=0,a} = 0$$

soit

$$A + B = 0$$

$$A \exp(ika) + B \exp(-ika) = 0 \Rightarrow \sin(ka) = 0$$

soit $ka = n\pi$

finalemt

$$a(x, t) = A \sin(kx) \exp(-i\omega t)$$

- 2D : la surface sur Oxy est limitée à $x \in [0, a]$ $y \in [0, b]$
La solution pour le champ $a(x, y)$

$$a(x, y) \sim \{ (A \exp(+ikx) + B \exp(-ikx)) \exp(+ik'y) + \\ (C \exp(+ikx) + D \exp(-ikx)) \exp(-ik'y) \}$$

La condition les bords

$$(a(x, y))_{x=0,a} = 0 \quad (a(x, y))_{y=0,b} = 0$$

soit

$$\begin{array}{lll} A + B = 0 & C + D = 0 & \sin(ka) = 0 \\ A + C = 0 & B + D = 0 & \sin(k'b) = 0 \end{array}$$

soit $ka = n\pi$ et $k'b = m\pi$

finalemt

$$a(x, y, t) = A \sin(kx) \sin(k'y) \exp(-i\omega t)$$

7.1.3 Le courant d'énergie associé à une onde classique ?

Il s'agit essentiellement de vibrations mécaniques dans un milieu continu autour d'un équilibre. La déformation du milieu induit une énergie potentielle par rapport à l'équilibre et le mouvement introduit l'énergie cinétique car le milieu est inerte. Soit une mesure réelle de la déformation $a(x, t) \in \mathcal{R}$

L'équation du mouvement est une équation de D'Alembert :

$$\Delta a - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 a}{\partial t^2} = 0$$

Le lagrangien (densité) qui conduit à cette équation est de la forme :

$$l = \frac{\sigma}{2}((\dot{a})^2 - (c \vec{grad} a)^2) \quad \text{ou } \sigma \text{ est une densité d'inertie}$$

$$\text{et le lagrangien } L(t) = \int l \, dx$$

Le courant d'énergie s'écrira :

$$\vec{j} = -\sigma c^2 \frac{\partial a}{\partial t} \times \frac{\vec{\partial} a}{\partial x} \text{ avec } a(x, t) \in \mathcal{R}$$

La densité d'énergie s'écrit (ou densité d'hamiltonien)

$$h = \dot{a} \frac{\partial l}{\partial \dot{a}} - l = \frac{\sigma}{2}(\dot{a})^2 + (c \vec{grad} a)^2 \quad \text{et l'hamiltonien } H(t) = \int h \, dx$$

Ces propriétés induisent la conservation du courant d'énergie

$$div(\vec{j}) = -\frac{\partial h}{\partial t}$$

7.1.4 Le courant associé à une onde quantique non relativiste ?

Il s'agit d'ondes de la mécanique quantique auxquelles sont associées les probabilités de mesurer tel ou tel observable. La fonction d'onde spatiale $\psi(x, t)$ satisfait à l'équation de Schrödinger :

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad \text{avec } H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

Le courant de probabilité dans l'espace s'écrira :

$$\vec{j} = \frac{1}{2m}(\psi^*(\vec{p}\psi) + \psi(\vec{p}\psi)^*) \text{ avec } \psi(x, t) \in \mathcal{C} \quad \vec{j} \in \mathcal{R}^3 \text{ et } \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

La densité de probabilité s'écrit

$$h = \psi^* \psi \quad \text{avec } h \in \mathcal{R}$$

Ces propriétés induisent la conservation du courant de probabilité

$$div(\vec{j}) = -\frac{\partial h}{\partial t}$$

Remarque Si l'onde est stationnaire $\dot{h} = -div(\vec{j}) = 0$

7.1.5 Les valeurs propres k sont discrètes : cas général ?