

MECANIQUE QUANTIQUE

Théorie qui fournit une description des **phénomènes physiques microscopiques** pour lesquels on peut négliger les **effets relativistes**.

La mécanique quantique coordonne les théories élaborées, au début du **XXe siècle**, pour surmonter les difficultés que les théories classiques de la matière et du rayonnement rencontraient dans l'interprétation du **corps noir**, de l'**effet photoélectrique**, des **spectres atomiques**, etc.

Pour expliquer ces phénomènes, on tenta d'abord d'ajouter des hypothèses « **ad hoc** » aux principes classiques, obtenant ainsi quelques résultats satisfaisants.

Mais la « **vieille théorie des quantas** » fut rapidement remplacée par la **mécanique ondulatoire**, qui associait à chaque système physique (**microscopique**) une fonction d'**onde ψ** régie par l'équation de **Schrödinger**.

Cette théorie rend compte de l'existence de niveaux d'énergie dans les atomes et permet de calculer la position des termes spectraux. **M. Born** donna une interprétation de type **probabiliste** à la fonction d'onde (que Schrödinger refusa) : pour un système constitué d'une seule particule et décrit par la fonction d'**onde ψ** , la quantité **$\psi \psi^* dv$** (où **ψ^*** est le complexe de **ψ**), désigne la probabilité de trouver la particule dans un **volume dv** autour du point, à l'**instant t** .

Au même moment, **W. Heisenberg** développait la **mécanique des matrices**, dans laquelle toute **variable dynamique** est représentée par une **matrice Q** .

En utilisant des raisonnements analogues à ceux de la mécanique classique, l'équation régissant l'évolution dans le temps de la **matrice Q** s'écrit :

$$i\hbar \frac{dQ}{dt} = QH - HQ$$

où **H** est la matrice obtenue par analogie avec fonction de Hamilton classique, en substituant aux variables dynamiques classiques les matrices de Heisenberg correspondantes, et où **\hbar** est la constante de Planck divisée par **2π** .

L'expression **$QH-HQ$** est appelée **commutateur** de **Q** et **H** , et se note généralement **(Q, H)** (sa valeur est non nulle puisque le produit des matrices n'est pas commutatif).

La reconnaissance de l'équivalence entre mécanique ondulatoire et mécanique des matrices fut le signe de la naissance de la mécanique quantique, énoncée dans sa forme actuelle par **P. Dirac**.

Selon la mécanique quantique, l'état d'un système physique est représenté par un **vecteur** de l'espace de **Hilbert** (un espace vectoriel abstrait doté d'un produit scalaire entre deux vecteurs que nous définirons plus bas) ; les variables dynamiques sont représentées par des **opérateurs linéaires** agissant sur les vecteurs (**états**) de l'**espace de Hilbert**, et l'évolution d'un système physique peut être décrite de deux façons.

La première est celle de Schrödinger qui consiste à considérer comme fixes les opérateurs et à supposer que c'est le vecteur représentant l'état qui évolue au cours du temps, selon l'équation :

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = H\psi$$

où ψ indique le vecteur état du système et H l'opérateur représentant l'énergie. L'espace de Hilbert étant abstrait, il est possible, au moins d'un point de vue théorique, de retrouver les résultats de la mécanique quantique sans jamais spécifier la nature concrète de ses éléments.

Cependant, l'application à des problèmes particuliers est considérablement facilitée par le choix d'une réalisation mathématique. Une réalisation possible est celle dans laquelle les vecteurs ψ sont des fonctions complexes de r , de carré sommable dans l'espace euclidien à trois dimensions, et où le produit scalaire de deux vecteurs est défini par :

$$\int \psi^*(r) \phi(r) d r,$$

l'intégrale s'effectuant sur l'espace tout entier. La mécanique ondulatoire correspond en fait à la mécanique quantique dans la description de Schrödinger avec comme réalisation particulière celle de l'espace de Hilbert.

La seconde description, celle de Heisenberg, suppose que les vecteurs d'état sont fixés et que ce sont les opérateurs qui évoluent au cours du temps suivant l'équation :

$$i\hbar Q' = [Q, H]$$

où Q' est dérivée par rapport au temps de Q . Cette description équivaut à celle de la mécanique des matrices lorsque l'on choisit une représentation de Hilbert dans laquelle les opérateurs linéaires sont des matrices (en général de dimensions infinies).

Il est possible, et parfois même préférable, de choisir une représentation intermédiaire, dans laquelle à la fois les opérateurs et les vecteurs d'états évoluent dans le temps. On peut démontrer que les opérateurs correspondant aux variables de position et d'impulsion satisfont la réalisation de commutation. :

$$[Q, P] = i\hbar$$

Où \mathbf{F} représente l'**opérateur identité**. Il en résulte que la position et l'impulsion ne peuvent être mesurées simultanément avec une précision arbitraire ; c'est le résultat fondamental énoncé par le principe d'indétermination de Heisenberg.

La mesure d'une variable dynamique \mathbf{Q} donnera un résultat bien déterminé q seulement si le vecteur Ψ , qui décrit l'état du système, satisfait l'équation $\mathbf{Q} \Psi = q \Psi$.

Lorsque cette condition est satisfaite, on dit que Ψ est le vecteur propre de \mathbf{Q} , correspondant à la valeur propre q .

Le caractère probabiliste de la mécanique quantique a conduit certains auteurs à considérer comme incomplète la description du monde qu'elle fournit.

C'est ainsi qu'A. Einstein, L. de Broglie et d'autres ont soutenu l'idée qu'il existe d'autres variables dynamiques, appelées **variables cachées**, dont la détermination devrait permettre de prédire avec toute la précision voulue le résultat d'une mesure. La question de l'existence des variables cachées est encore ouverte.