Préliminaire : qu'est-ce qu'une théorie en physique ?

L'expérience, voilà le maître en toutes choses
Jules César

Avant d'aborder la mécanique quantique, il faut préciser un peu la démarche du physicien et en particulier ce qu'est une théorie en physique. Le but d'une théorie est de décrire la nature le plus précisément possible. Pour voir comment la nature se comporte on fait des expériences, au cours desquelles on effectue des mesures. Une théorie acceptable est alors un ensemble d'axiomes, appelés principes, à partir desquels on peut expliquer les résultats des expériences. Si les résultats déduits des principes de la théorie sont compatibles avec les résultats des expériences, la théorie n'est pas encore fausse. En effet, on ne peut pas prouver expérimentalement qu'une théorie est vraie pour la simple et bonne raison qu'on peut imaginer une infinité d'expériences pour la tester. Une théorie doit également pouvoir prédire les résultats d'expériences qui n'ont jamais été réalisées dans le passé de sorte qu'elle soit potentiellement falsifiable et donc scientifique au sens de Popper[1]. Il y a donc deux aspects dans une théorie : expliquer les résultats d'expériences passées et prédire ceux de nouvelles expériences.

Dans une théorie on est amené à faire des modèles et à conceptualiser la réalité. La phrase magique du physicien est : "**tout se passe comme si...** " . Ainsi en mécanique newtonienne, on développe les concepts de point matériel et de force, en mécanique quantique on décrit les états d'un système par des vecteurs et en relativité générale on décrit l'espace-temps par une variété (c'est un objet mathématique qui décrit des géométries non euclidiennes). Mais nous pensons que se demander si les forces existent vraiment ou si les objets quantiques sont vraiment des vecteurs n'a pas de sens : la physique ne se prononce en aucun cas sur la nature ultime de la réalité. Elle se contente de prédire les résultats de mesures sans se demander de quoi est vraiment fait le monde, puisqu'il n'existe aucun moyen de le savoir. Tous les concepts les plus abstraits utilisés en physique ont pour unique but de décrire correctement les résultats d'expériences.

Cependant, bien qu'on ne se prononce pas sur la réalité du monde, il est tout-à-fait remarquable qu'il puisse être décrit au moins en partie à l'aide de théories "simples", comme s'en étonnait Einstein. Ainsi le modèle standard, qui décrit toute la physique

[1] Il y a cependant une difficulté de définition liée au fait qu'on interprète une expérience dans un cadre conceptuel donné.

des particules connue aujourd'hui, ne nécessite qu'une vingtaine de paramètres comme la masse ou la charge de l'électron pour décrire les résultats d'énormément d'expériences. C'est ce qui donne l'espoir aux physiciens d'arriver un jour à décrire l'ensemble de l'univers de manière unifiée. Cette notion de théorie "simple" est très importante. En effet, si une théorie est plus grosse que l'ensemble des résultats expérimentaux qu'elle explique, alors elle n'explique rien du tout.

Pour finir, précisons qu'en physique il faut faire la distinction entre méta-théorie et théorie. Qu'est-ce qu'une méta-théorie ? En fait, après plus de 2000 ans d'étude de la physique, les physiciens en sont arrivés à croire plus que religieusement à la validité inébranlable de quelques principes. Parmi ces principes on peut compter la conservation de l'énergie. De tels principes ont été confirmés par l'expérience tellement de fois que les physiciens les incluent systématiquement dans toute ébauche de nouvelle théorie. Ces principes rassemblés forment le squelette de ce que l'on appelle une méta-théorie.

Nous donnons sur la figure 1 une sorte de panorama de la physique.

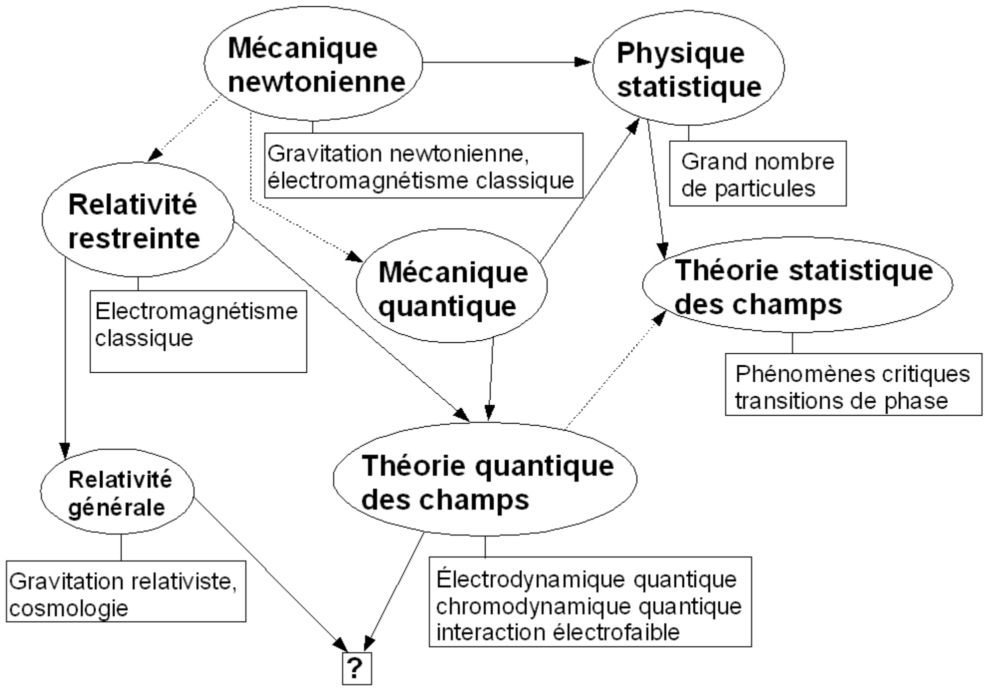

FIG. 1 – "Panorama" de la physique.

Chapitre 1

Une première discussion des principes de la mécanique quantique

Les culs de sac, c'est que dans la tête
xXx

Ce chapitre est une introduction au vocabulaire et aux notions de la mécanique quantique. Il permettra, nous l'espérons, de vous donner les clés de la compréhension du langage de la mécanique quantique. Nous allons commencer par donner des définitions générales puis nous illustrerons ces définitions sur un exemple simple.

1.1 Les systèmes quantiques

En physique classique, un système (ou système classique) est un objet ou un ensemble d'objets qui peuvent être des atomes, des photons (les particules de lumière), des boules de pétanque, et donc en fait un peu ce que l'on veut.

En mécanique quantique, un système (ou système quantique) est également une collection d'objets. Un objet est quelque chose que l'on peut détecter, comme un atome, un photon (particule de lumière), un électron, une voiture... Parmi les objets, certains apparaissent comme fondamentaux (qu'on détecte toujours comme étant faits d'un seul élément). On les appelle les particules élémentaires. Mais il faut faire attention à cette définition. en effet, un biologiste peut considérer le noyau atomique comme une particule élémentaire, mais pas le physicien des particules. En fait, tout dépend de l'échelle d'énergie à laquelle on regarde les choses. A l'échelle d'énergie ordinaire, un noyau atomique se comporte comme une particule élémentaire, mais à haute énergie dans un accélérateur de particules on va pouvoir le casser et constater qu'il n'est en fait pas élémentaire : il est constitué de protons et de neutrons. De même, si on monte encore en énergie on devra décrire les protons et les neutrons avec des quarks. Jusqu'où cela peut-il aller ? On n'en sait rien, car il n'existe aucune expérience qui permet de dire qu'une particule est élémentaire à toutes les échelles d'énergie, puisqu'il faudrait monter de plus en plus haut en énergie.

Les particules possèdent des propriétés simples qui les caractérisent complètement : elles ont une masse, une charge électrique... Il est donc naturel de décrire la nature en terme de particules. Mais il faut faire attention à cette image, car comme on va le voir, l'état d'un système quantique ne se réduit pas à l'état de chacune des particules qui le composent, contrairement à ce que peut laisser penser le bon sens.

1.2 Les états quantiques

Un système physique peut se trouver dans différents états (quantiques). Heureusement d'ailleurs, sinon le monde serait figé. Nous définissons un **état** quantique d'un système quantique comme l'ensemble des caractéristiques physiques de ce système qui nous permet d'acquérir **toute** l'information possible sur le système. La connaissance de l'état quantique d'un système donne toute l'information imaginable sur le système, et aucune information qui n'est contenue dans l'état ne peut être obtenue. Vous avez envie de jeter le livre par la fenêtre après avoir lu cela ? C'est normal, et même si cette définition ne résonne pas en vous avec autant de force que pour nous, c'est la définition la plus honnête et la plus générale que nous avons pu trouver après quelques années d'étude de la mécanique quantique.

Ceci n'a pas l'air de vous avancer beaucoup, mais il existe une propriété extraordinaire des états : on sait comment ils se comportent mathématiquement, et c'est tout ce qu'un physicien a besoin de savoir pour être heureux. En effet, l'expérience a montré que les états quantiques d'un système peuvent **s'additionner**. Eh oui, les états quantiques sont des **vecteurs**. Cela veut dire qu'on peut représenter l'état d'un système par un objet mathématique qu'on appelle un vecteur, et qui vit dans un espace mathématique qu'on appelle l'espace des états physiques du système. Puisque ce sont des vecteurs et que ce sont des états quantiques, désormais nous les appellerons "**vecteurs d'état**". Un système physique est donc entièrement caractérisé par son vecteur d'état. Toute l'information du système est contenue dans son vecteur d'état.

Evidemment, au premier abord, la réalité du monde vue sous l'angle de la mécanique quantique est légèrement brutale. Mais finalement, après avoir étudié cette théorie, il nous semble que la seule difficulté dans tout cela est qu'il faille **accepter** que l'état quantique d'un système est décrit par un **vecteur**. Nous définirons au chapitre 3 proprement et rigoureusement ce qu'est un vecteur d'état, mais nous allons dès à présent commencer à les manipuler pour nous familiariser avec leurs propriétés mathématiques. Et **LA** propriété fondamentale est l'**ADDITION**. On peut faire la somme de deux vecteurs d'état et on obtient alors un autre vecteur d'état. Voici donc notre premier principe de mécanique quantique :

Principe
Les états quantiques d'un système sont représentés par des vecteurs d'état.

Ce qu'il faut comprendre, c'est que c'est le système en entier qui est décrit par un vecteur d'état. Prenons un exemple : imaginez un système constitué de trois particules. En mécanique quantique, on n'associe **pas** un vecteur d'état à la particule 1, puis un autre vecteur d'état à la particule 2 et enfin un troisième vecteur d'état à la particule 3. C'est le **système total** (l'ensemble des trois particules considéré comme un **tout**) qui est décrit par **un** vecteur d'état.

En mécanique quantique, et dans toute la suite du livre, les vecteurs d'état sont notés à l'aide du symbole $|\rangle$. Par exemple pour dire qu'un électron est dans l'état "se trouve en x,y,z", on notera $|x, y, z\rangle$.

1.3 Les appareils de mesure et la mesure

Lorsqu'on se trouve face à un système, on peut vouloir en obtenir des informations, par exemple quelle est sa masse, sa couleur, son énergie, le nombre de particules qui le constituent, sa vitesse, si un courant électrique le traverse... Mais encore faut-il savoir précisément ce que signifie "faire une mesure". Et c'est beaucoup moins évident qu'il n'y paraît ! La mécanique quantique pose de très profondes questions sur le sens de l'acte de mesurer.

1.3.1 Qu'est-ce qu'un appareil de mesure ?

Lorsqu'on fait une mesure, fondamentalement ce que l'on fait c'est qu'on prend un système et on en tire un nombre. En physique quantique un appareil de mesure est donc une boîte qui interagit avec le système, et qui par cette interaction acquiert de l'information sur le système sous forme d'un nombre. Le résultat d'une mesure est toujours un **nombre réel**, qu'on peut éventuellement afficher sur un écran. Par exemple, regarder un thermomètre c'est effectuer une mesure de la température. Un radar mesure la vitesse d'une voiture. Vos yeux mesurent la position des objets. Mais dans ce cas quel est le nombre associé à la mesure ? Eh bien par exemple on peut compter les impulsions électriques qui se propagent le long du nerf optique. On peut aussi dire que les images formées sur la rétine sont ensuite interprétées en termes de distance entre les objets par le cerveau, et les distances sont des nombres. Vous pouvez également regarder si une lampe est allumée ou éteinte, et déclarer que si la lampe est allumée le résultat de la mesure est 1 et que si elle est éteinte le résultat de la mesure est 0. On voit donc que l'on peut toujours associer des nombres à un processus de mesure. Ces nombres sont ceux indiqués par l'appareil de mesure.

1.3.2 Le caractère aléatoire de la mesure en mécanique quantique

L'expérience montre que si l'on réalise la même mesure sur deux systèmes parfaitement identiques, on peut trouver deux valeurs différentes pour cette même mesure. Cela est dû au fait que la mesure quantique possède un côté aléatoire, probabiliste : lorsqu'on prépare des systèmes identiques dans le même état quantique et qu'on fait la même mesure sur ces systèmes, on **peut** trouver des valeurs **différentes**, mais on trouve chaque valeur avec une **probabilité bien définie** qui ne dépend **que** du

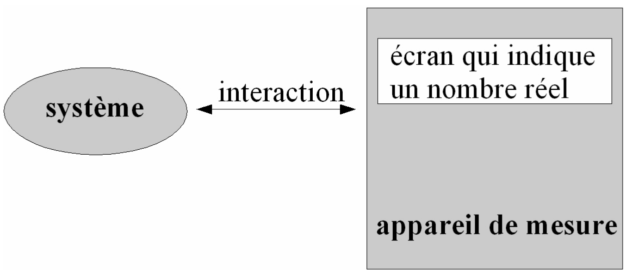

FIG. 1.1 – Schéma d'un appareil de mesure.

vecteur d'état du système. Ce caractère aléatoire ne provient pas de l'imprécision des appareils de mesure, mais de la nature intrinsèquement probabiliste de la mécanique quantique. Il faut bien garder cela à l'esprit : même avec un appareil de mesure infiniment précis, le résultat d'une mesure est fondamentalement aléatoire.

Qu'entend-on par probabilité en mécanique quantique ? Cela signifie très exactement la chose suivante : si l'on fait une mesure individuelle sur un système, on ne peut en général pas prévoir quel sera le résultat de la mesure. Précisément, là où interviennent les probabilités en mécanique quantique est que si l'on prépare un grand nombre de systèmes **identiques** avec le **même** vecteur d'état, et si l'on fait la **même** mesure sur chacun de ses systèmes, on obtient un ensemble de résultats possibles, chacun de ces résultats apparaissant avec une certaine probabilité. Cela veut dire que si on fait tendre le nombre de mesures (donc aussi le nombre de systèmes puisqu'il y a une seule mesure par système) vers l'infini, le nombre de fois où l'on a trouvé un certain résultat de la mesure divisé par le nombre total de mesures tend vers une limite qui est la probabilité de trouver ce résultat. L'ensemble de ces probabilités est **entièrement** déterminé par le **vecteur d'état**.

Résumons-nous : un appareil de mesure est un objet physique qui interagit avec le système et qui nous permet de mesurer une propriété du système comme sa masse, sa vitesse, sa charge électrique. Et ce qu'indique l'appareil de mesure comme résultat de la mesure est toujours un **nombre réel**.

1.3.3 Les valeurs propres et les vecteurs propres

Supposons que nous disposions d'un système et d'un appareil de mesure, et que nous fassions les opérations suivantes :

1. A l'instant t, on effectue une première mesure sur le système à l'aide de l'appareil de mesure. On trouve une valeur V_1.
2. On attend pendant un intervalle de temps Δt.
3. A l'instant $t + \Delta t$, on effectue une seconde mesure sur le système à l'aide du même appareil de mesure. On trouve une valeur V_2.

L'intuition nous dit que si l'intervalle de temps Δt est suffisamment petit, tellement petit que le système n'a pas eu le temps d'évoluer, alors la valeur V_2 trouvée lors de la seconde mesure doit être la même que la valeur V_1 obtenue lors de la première mesure. Il se trouve que ceci est effectivement vérifié expérimentalement : à la limite où l'intervalle de temps Δt entre les deux mesures tend vers 0, la valeur V_2 obtenue à la seconde mesure est la même que la valeur V_1 obtenue à la première mesure.

Ce simple fait a de profondes implications en mécanique quantique. En effet, si l'appareil de mesure donne toujours le même nombre lors de la **seconde mesure** (si Δt tend vers 0) c'est que le vecteur d'état qui caractérise l'état du système juste après la **première mesure** possède une propriété extraordinaire : on est **sûr**, avec probabilité 1, de trouver un certain nombre (celui indiqué lors de la première mesure, en l'occurence V_1) lors de la seconde mesure.

Pourtant, nous avions dit plus haut que la mesure possédait un caractère aléatoire, et que le résultat de cette dernière n'était pas prévisible. Serions-nous en train de nous contredire ? Pas du tout ! En effet, considérons la loi de probabilité qui vaut 0 partout sauf pour une éventualité pour laquelle elle vaut 1 : c'est bien une loi de probabilité, pour laquelle on est sûr du résultat.

En général, le résultat d'une mesure n'est pas prévisible, mais nous venons de montrer qu'il existe des états quantiques particuliers, qu'on appelle des **états propres**, pour lesquels le résultat de la mesure est absolument certain (probabilité égale à 1). Le résultat de la mesure est alors appelé **valeur propre**. Le résultat d'une mesure sur un système qui est dans un état propre est la valeur propre associée à cet état propre. **Après** une mesure sur un système, le système se trouve toujours dans un **état propre**.

D'un appareil de mesure à l'autre, les états propres peuvent être différents, c'est pourquoi on parlera d'états propres relatifs à un appareil de mesure. Lorsqu'un système se trouve dans un état qui est un état propre, on dit que son vecteur d'état est un vecteur propre. Nous allons maintenant préciser le sens mathématique de cela.

1.3.4 Les observables

Nous allons introduire un nouvel objet mathématique pour caractériser les valeurs propres et les vecteurs propres d'un appareil de mesure. Cet objet s'appelle **observable**. C'est un opérateur **linéaire**. Pour le moment cela ne signifie rien pour vous, mais nous allons voir ce que cela veut dire. En fait un opérateur est une fonction.

Qu'est-ce qu'une fonction ? Une fonction est un objet qui part d'un ensemble de départ (ou ensemble de définition) pour aller vers un ensemble d'arrivée, et qui à chaque élément de l'ensemble de départ associe un élément de l'ensemble d'arrivée. Par exemple une fonction de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$ comme par exemple $x \longmapsto cos(x)$ est une fonction qui part de l'ensemble des réels (c'est son ensemble de définition) et dont l'ensemble d'arrivée est aussi $\mathbb{R}$. Au réel x elle associe $cos(x)$. Il y a aussi des fonctions de $\mathbb{C}$ dans $\mathbb{R}$, comme par exemple $z \longmapsto |z|$ qui a un nombre complexe associe son module. On peut très bien imaginer des fonctions dont l'ensemble de définition est constitué de l'ensemble des vecteurs du plan et dont l'ensemble d'arrivée est $\mathbb{C}$, comme par exemple $\vec{u} \longmapsto e^{i\|\vec{u}\|^2}$ (à un vecteur elle associe l'exponentielle de i fois sa norme au carré, avec $i^2 = -1$).

Un **opérateur** est une fonction dont l'ensemble de départ est un espace de vecteurs (un espace vectoriel) et dont l'ensemble d'arrivée est un espace vectoriel. Il prend donc un vecteur en entrée et donne un vecteur en sortie. Par exemple l'application qui prend un vecteur du plan $\vec{u}$ et donne un autre vecteur du plan : le vecteur $\vec{v}$ qui est le vecteur $\vec{u}$ ayant subi une rotation, est un opérateur. **Les observables sont des opérateurs** (et donc un certain type de fonctions), donc en résumé, si $\hat{O}$ est une observable alors :

$$\hat{O} \ : \ \begin{array}{ccc} \text{Espace vectoriel} & \longrightarrow & \text{Espace vectoriel} \\ |\text{vecteur d'état}\rangle & \longmapsto & \hat{O}\,|\text{vecteur d'état}\rangle \end{array} \tag{1.1}$$

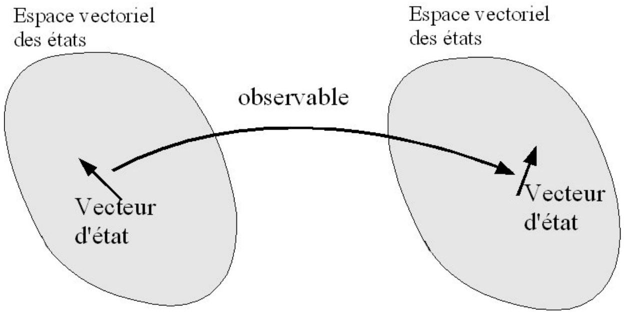

FIG. 1.2 – Une observable associe à chaque vecteur d'état un vecteur d'état.

Plus précisément, les observables sont des opérateurs **linéaires**. Le mot linéaire signifie les choses suivantes :

- l'opérateur appliqué à la somme de deux vecteurs est la somme de l'opérateur appliqué au premier vecteur et de l'opérateur appliqué au second vecteur : si $\vec{u}$ et $\vec{v}$ sont deux vecteurs et si $\hat{O}$ est une observable alors

$$\hat{O}\left(\vec{u}+\vec{v}\right) = \hat{O}\left(\vec{u}\right) + \hat{O}\left(\vec{v}\right)$$

- on peut sortir les constantes multiplicatives : si $\vec{u}$ est un vecteur, si λ est un nombre et $\hat{O}$ une observable alors

$$\hat{O}\left(\lambda\vec{u}\right) = \lambda\hat{O}\left(\vec{u}\right)$$

Nous le répétons encore une fois : **une observable est un opérateur linéaire**. A l'aide de ce nouvel objet on peut caractérier mathématiquement les valeurs propres et les vecteurs propres. En effet à chaque appareil de mesure on peut associer une observable. Un vecteur d'état non nul $|\text{état}\rangle$ est un vecteur propre de l'observable $\hat{O}$ s'il existe un nombre λ tel que :

$$\hat{O}\,|\text{état}\rangle = \lambda\,|\text{état}\rangle \tag{1.2}$$

c'est-à-dire si $\hat{O}\,|\text{état}\rangle$ est proportionnel à $|\text{état}\rangle$. Le nombre λ est alors appelé valeur propre de l'observable $\hat{O}$. Les vecteurs propres d'une observable sont donc certains vecteurs d'état particuliers.

Tout cela peut sembler un peu abstrait, mais l'utilité de cet objet apparaîtra avec la manipulation des vecteurs d'état. Pour l'instant, nous allons illustrer ce qui vient d'être vu sur un exemple simple.