

MÉCANIQUE QUANTIQUE

En 1892, Lord Kelvin écrivait : "*La physique est définitivement constituée dans ses concepts fondamentaux. Tout ce qu'elle peut désormais apporter, c'est la détermination précise de quelques décimales supplémentaires. Il y a bien deux petits problèmes : celui du résultat négatif de l'expérience de Michelson et celui du corps noir, mais ils seront rapidement résolus et n'altèrent en rien notre confiance ...*".

Table des matières

I	Fonction d'onde	2
1)	Le cas de la lumière : onde ou corpuscule?	2
2)	Retour sur l'expérience des trous d'Young	2
3)	Cas de la matière "usuelle" : électrons, protons	3
4)	L'interprétation de la théorie quantique	4
5)	Fonction d'onde	5
6)	Indétermination quantique sur la position de la particule	6
7)	Indétermination quantique sur l'impulsion	7
8)	Inégalité de Heisenberg	8
II	Évolution de la fonction d'onde dans l'espace et le temps	9
1)	Équation de Schrödinger	9
2)	Théorème de superposition. Indétermination de phase	9
3)	Influence d'un décalage de l'origine de l'énergie potentielle	9
4)	Densité de courant de probabilité	10
III	Énergie et quantité de mouvement en mécanique quantique	11
1)	Approche historique	11
2)	Postulat de Planck-Einstein	12

3)	États stationnaires quantiques	12
a)	Définition	12
b)	Énergie associée à un état stationnaire quantique	12
c)	Équation de Schrödinger indépendante du temps. Hamiltonien	13
4)	Espace vectoriel des états quantiques	13
5)	Théorème du minimum d'énergie	14
6)	Exemple de la particule libre	15
7)	Notions élémentaires sur les états superposés	16

I Fonction d'onde

1) Le cas de la lumière : onde ou corpuscule ?

Les expériences d'optique peuvent être interprétées par deux théories qui semblent s'exclurent mutuellement :

- La théorie ondulatoire qui assimile la lumière à une onde : cette théorie est très efficace pour décrire les phénomènes d'interférences.
- La théorie corpusculaire qui assimile la lumière à un ensemble de particules appelées *photons*. Cette façon de voir permet d'expliquer les spectres d'émission et d'absorption des atomes.
- De plus, dans le cas d'une lumière monochromatique de fréquence ν_0 , l'énergie d'un photon s'écrit : $E = h\nu_0$. Comment l'énergie d'une particule peut-elle dépendre de la fréquence d'une onde ?

2) Retour sur l'expérience des trous d'Young

- Dans la théorie ondulatoire, la lumière émise par une source (ponctuelle) S est une onde $a(S, t)$. Dans le cas particulier d'une lumière monochromatique de pulsation ω_0 on peut l'écrire en complexes sous la forme :

$$\underline{a}(S, t) = A_m e^{i\varphi_0} e^{i\omega_0 t}$$

Dans l'expérience des trous d'Young, la lumière reçue en un point M est la somme des deux ondes qui sont passées respectivement par le trou T_1 et par le trou T_2 :

$$\underline{a}_1(M, t) = t \underline{a}(S, t - \tau_1) = t e^{-i\omega_0 \tau_1} \underline{a}(S, t)$$

et

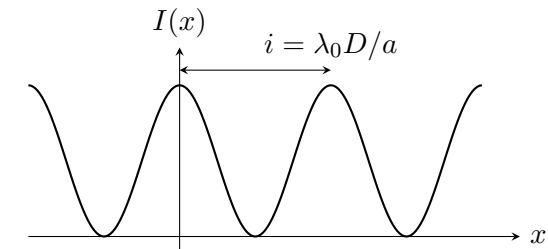
$$\underline{a}_2(M, t) = t \underline{a}(S, t - \tau_2) = t e^{-i\omega_0 \tau_2} \underline{a}(S, t)$$

où τ_1 et τ_2 sont les temps de propagation de S à M en passant par T_1 et en passant par T_2 respectivement. L'onde reçue en M est la somme (en complexe)

$$\underline{a}(M, t) = \underline{a}_1(M, t) + \underline{a}_2(M, t)$$

L'intensité lumineuse détectée en M est alors donnée par la formule de Fresnel :

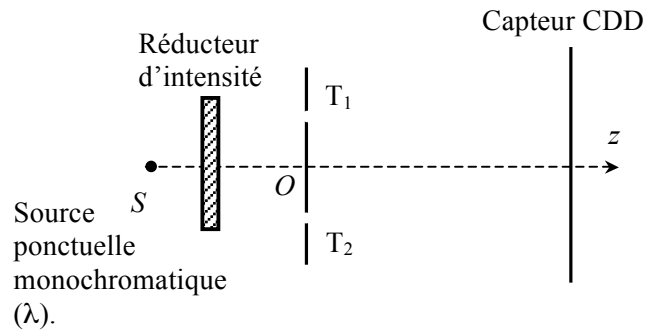
$$I(M) = \frac{|\underline{a}(M, t)|^2}{2} = 2t^2 I_S [1 + \cos(\omega_0 \tau)] \quad \text{avec} \quad \tau = \tau_1 - \tau_2 = \frac{\delta(M)}{c} \approx \frac{ax}{cD}$$



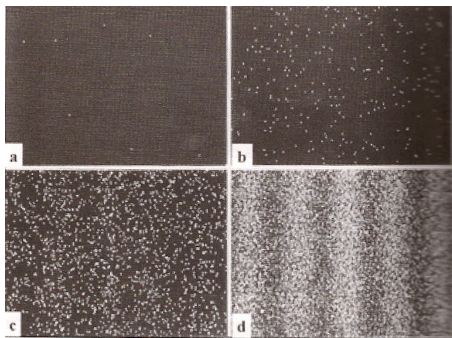
- Dans la théorie corpusculaire, la source S est censée émettre des particules (photons) ayant tous la même énergie $E = h\nu_0 = \hbar\omega_0$. L'intensité lumineuse I_S de la source est alors proportionnelle au nombre de photons qu'elle émet par unité de temps.

Une des nombreuses questions qui se posent est de savoir ce qu'il se produit si, dans l'expérience des trous d'Young, on réduit le nombre de photons émis par seconde jusqu'au point où ceux-ci sont **envoyés un à un dans le dispositif**.

L'écran d'observation est remplacé par un capteur CDD dont la surface est divisée en petits éléments rectangulaires (pixels) permettant d'enregistrer l'impact des photons.



Résultat :



- Chaque photon ayant traversé le dispositif produit sur le détecteur un **impact ponctuel** : aussi petits que soient les pixels, un seul pixel génère un signal électrique, à l'exclusion de tous les autres.
- Les impacts des différents photons se produisent de façon **aléatoire**. Individuellement, les photons se répartissent au hasard sur la surface du capteur, sans ordre apparent.

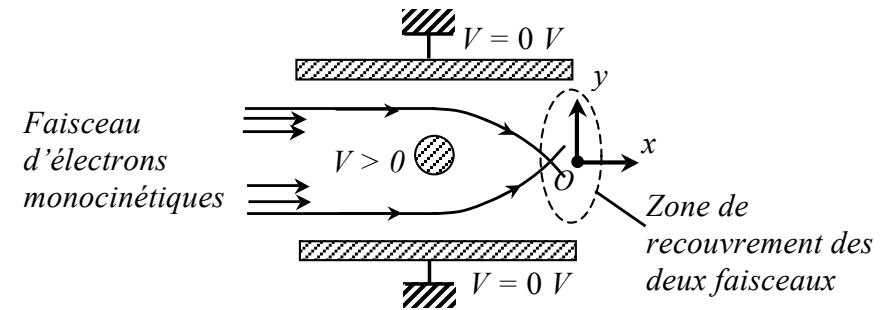
- Ce n'est qu'au fur et à mesure que le nombre d'impacts de photons s'élève qu'on voit se dessiner progressivement la figure d'interférence classique, formée de franges rectilignes alternativement brillantes et sombres.

La densité d'impact de photons est très élevée dans les zones qui donnent des franges brillantes, alors qu'elle est nulle dans les zones donnant des franges sombres.

3) Cas de la matière "usuelle" : électrons, protons

Cette expérience peut être répétée avec des particules comme des électrons, protons, etc... : il est possible de concevoir des expériences analogues au dispositif des trous d'Young.

Exemple : expérience de Tonomura en 1989



- On produit un faisceau d'électrons **monocinétiques** (de même vitesse) $\vec{v}_0 = v_0 \vec{e}_z$ donc de même énergie cinétique $E_c = \frac{1}{2}mv_0^2 \iff$ Faisceau de photons de même énergie dans une onde lumineuse monochromatique.

- Ce faisceau arrive sur un dispositif formé de trois électrodes métalliques : deux électrodes planes latérales reliées à la Terre, ce qui les porte au potentiel $V = 0$ V et une électrode cylindrique centrale portée à un potentiel positif ($V > 0$).

Cela crée un champ électrique qui "rabat" les deux demi-faisceaux passés en haut et en bas du dispositif vers la région centrale où ils se superposent, après avoir emprunté deux chemins différents \iff *dispositif interférentiel*.

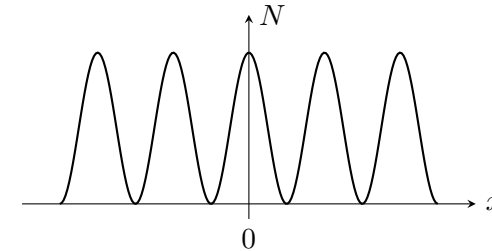
- On place dans la zone du recouvrement un détecteur sensible aux impacts des électrons, qui joue un rôle analogue à celui d'un écran d'observation en optique. Ce détecteur est constitué de petites cellules sensibles formant des "pixels" et qui sont reliées à des compteurs : on peut donc compter le nombre d'impacts sur chaque cellule.

Résultat :

Les observations sont identiques à ce qui se passe pour les photons :

- Lorsque les électrons arrivent un à un, leur impact sur les capteurs se produit de façon aléatoire.
- Lorsque le nombre des impact devient important, la courbe qui représente le nombre d'impacts N en fonction de l'abscisse x devient sinusoïdale avec une période spatiale i (interfrange) caractéristique d'une figure d'interférences à deux ondes :

$$N = N_0 \left[1 + \cos \left(2\pi \frac{x}{i} \right) \right]$$



- Si on suppose que le faisceau d'électrons émis par la source S est en fait une onde monochromatique de pulsation ω_0 :

$$a(S, t) = A_s e^{i\varphi_0} e^{i\omega_0 t}$$

et qu'on fait un calcul classique de différence de marche $\delta(x)$ entre les deux ondes qui viennent se superposer, on trouve la bonne valeur de l'interfrange i à condition que la fréquence ν_0 soit liée à l'énergie des électrons par une relation du type :

$$\boxed{\frac{1}{2}mv_0^2 = h\nu_0 = \hbar\omega_0}$$

où h est la constante de Planck...

4) L'interprétation de la théorie quantique

Comment concilier ces deux aspects ? La réponse de la théorie quantique formulée par Max Born, Werner Heisenberg et Erwin Schrödinger dans les années 1925 - 1926 est la suivante :

1. Les particules microscopiques (électrons, protons, photons, etc...) sont ponctuelles et indivisibles car elles provoquent des impacts ponctuels les capteurs.
2. Cependant, l'aspect aléatoire de ces impacts fait qu'on *ne peut formuler que des lois de nature probabiliste* quant à la position de ces particules.

3. Comme on observe que lorsque le nombre d'impacts devient élevé, ceux-ci reproduisent la figure d'interférence donnée par la théorie ondulatoire, on doit admettre que *certaines positions sont plus probables que d'autres*. La probabilité que l'impact se produise à l'abscisse x sur l'écran est proportionnelle à :

$$\left[1 + \cos\left(\frac{2\pi x}{i}\right) \right]$$

4. Or cette formule provient du carré du module d'une onde complexe $\underline{a}(M, t)$. Ainsi :

La probabilité que la particule se trouve en M est donc proportionnelle à $|\underline{a}(M, t)|^2$

5) Fonction d'onde

En laissant de côté le photon qui nécessite un traitement spécial, la mécanique quantique adopte le point de vue énoncé ci-dessous :

À toute particule élémentaire de masse m est associé une **fonction d'onde à valeurs complexes** $\Psi(M, t)$, dont *le carré du module décrit la probabilité de présence de la particule au point M* . Plus précisément :

P1 (Fonction d'onde)

À toute particule non relativiste, de masse m , on associe une onde scalaire décrite par un champ scalaire $\Psi(M, t)$ à valeurs complexes. $\Psi(M, t)$ est la **fonction d'onde** associée à la particule.

P2 (Interprétation probabiliste de Ψ)

La probabilité pour que la particule se trouve à l'instant t dans un petit élément de volume $d\tau_M$ entourant un point M est donnée par :

$$\delta \mathcal{P}(M, t) = |\Psi(M, t)|^2 d\tau_M$$

$|\Psi(M, t)|^2$ est la densité de probabilité de présence.

La probabilité pour que la particule soit dans un volume V à l'instant t s'obtient en sommant les probabilités. On a donc :

$$\mathcal{P}(V, t) = \iiint_V |\Psi(M, t)|^2 d\tau_M$$

Remarques :

- Au concept classique de trajectoire il faut substituer celui **d'état quantique**. L'état quantique d'une particule (électron, proton,...) est caractérisé par une **fonction d'onde** $\Psi(M, t)$ qui contient toutes les informations qu'il est possible d'obtenir sur la particule.
- Cette fonction d'onde ne représente pas la propagation d'un signal physique. Il s'agit d'une **onde de probabilité**. $\Psi(M, t)$ est appelée **amplitude de probabilité de présence** de la particule au point M et à l'instant t .
- Comme la particule est nécessairement présente quelque part dans l'espace, la probabilité totale, obtenue par intégration sur tout l'espace, vérifie :

$$\forall t, \iiint_{\text{Espace}} |\Psi(M, t)|^2 d\tau_M = 1$$

6) Indétermination quantique sur la position de la particule

Pour simplifier on va uniquement considérer dans la suite le cas où la fonction d'onde ne dépend que d'une seule coordonnée d'espace : x par exemple. On a alors $\Psi(x, t)$ et on dira que le problème est *unidimensionnel*

On note X l'abscisse de la particule sur l'axe Ox , à ne surtout pas confondre avec x qui intervient dans la fonction d'onde.

Une des idées fondamentales de la mécanique quantique est que X est une **variable aléatoire** caractérisée par la probabilité :

$$\mathcal{P}(x_a \leq X \leq x_b, t) = \int_{x_a}^{x_b} |\Psi(x, t)|^2 dx$$

qui est la probabilité pour que X soit comprise entre x_a et x_b à l'instant t . En particulier :

$$\forall t, \mathcal{P}(-\infty \leq X \leq +\infty, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

On dit que Ψ est de carré sommable en x .

Espérance :

Écart-type :

Interprétation statistique :

Imaginons une expérience de pensée dans laquelle il existe $N \gg 1$ Univers identiques avec dans chaque univers une particule dont l'état quantique est décrit par la fonction d'onde $\Psi(x, t)$ (la même dans tous les univers).

Dans chaque Univers, un physicien mesure à l'instant t la position de la particule avec des appareils de mesure infiniment précis. Chaque physicien envoie ensuite son résultat à une entité supérieure (Maître Yoda par exemple) qui se charge de reporter tous les résultats sur un histogramme.

Afin de mieux présenter les résultats, l'axe Ox en tranches découpé a été, avec un pas δx assez petit et Maître Yoda par N_k le nombre de mesures qui obtiennent $k \delta x \leq X < (k + 1)\delta x$, avec $k \in \mathbb{Z}$ a désigné (comme $N \gg 1$, que la force soit avec lui pour dessiner un joli histogramme!)

Le fait que X soit une variable aléatoire va se manifester par **la dispersion des résultats de mesures**, illustrée sur la **figure 5**.

Lorsque le nombre de mesures devient très grand la valeur moyenne des résultats tend vers l'espérance de X :

$$\langle X \rangle(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} N_k x_k \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx$$

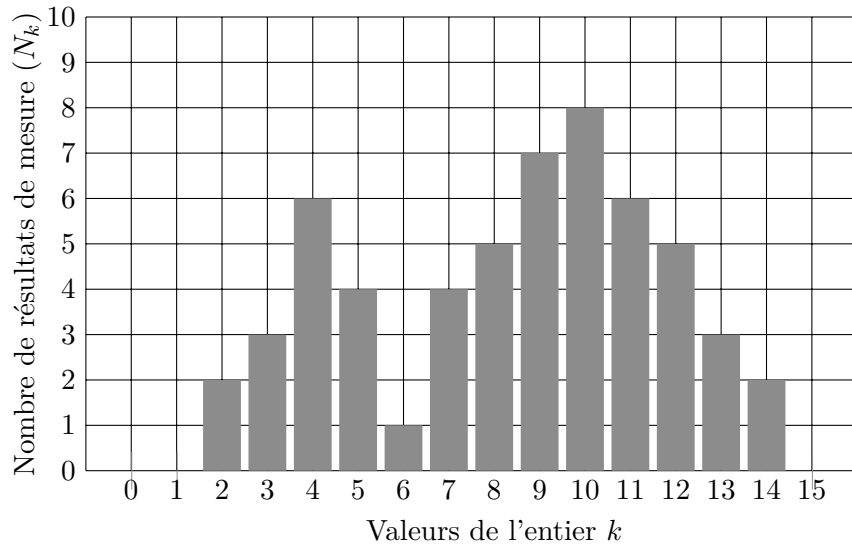


Figure 5 : dispersion des résultats de mesure sur la position

7) Indétermination quantique sur l'impulsion

L'impulsion d'une particule supposée ponctuelle de masse m l'autre nom pour désigner sa quantité de mouvement :

$$\vec{p} = m \vec{v}$$

Comme on se restreint à un problème unidimensionnel sur l'axe Ox , l'impulsion de la particule sera mv_x et on la note P_x . De la même façon que pour la position X , l'impulsion P_x devient une variable aléatoire : avant de faire une mesure, on ne sait jamais à l'avance le résultat qu'on va trouver !

La probabilité associée à l'impulsion est hors programme. Disons juste que la théorie quantique introduit la transformée de Fourier

spatiale de la fonction d'onde $\Psi(x, t)$:

$$\tilde{\Psi}(p_x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) e^{-i \frac{p_x x}{\hbar}} dx$$

et que la probabilité pour que P_x soit comprise entre p_{xa} et p_{xb} à l'instant t est donnée par :

$$\mathcal{P}(p_{xa} \leq P_x \leq p_{xb}, t) = \int_{p_{xa}}^{p_{xb}} |\tilde{\Psi}(p_x, t)|^2 dp_x$$

À cette variable aléatoire on pourra associer :

- La valeur moyenne (espérance) :

$$\langle P_x \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} p_x |\tilde{\Psi}(p_x, t)|^2 dp_x$$

- Son écart type, appelé **indétermination quantique sur l'impulsion** :

$$\Delta P_x(t) = \sqrt{\langle P_x^2 \rangle(t) - [\langle P_x \rangle(t)]^2}$$

avec :

$$\langle P_x^2 \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} p_x^2 |\tilde{\Psi}(p_x, t)|^2 dp_x$$

Si on reprend notre expérience de pensée avec $N \gg 1$ Univers et que nos N physiciens mesurent au même instant t la composante P_x selon l'axe Ox de l'impulsion de la particule avec une fonction d'onde $\Psi(x, t)$ (la même dans tous les Univers), notre bon p'tit Yoda constatera là aussi *une dispersion des résultats de mesure*.

Un pas en impulsion δp très petit est à nouveau introduit et si N_k est le nombre de physiciens ayant mesuré une impulsion P_x comprise entre $k \delta p$ et $(k+1) \delta p$, alors l'histogramme aura par exemple la forme donnée sur la **figure 6**.

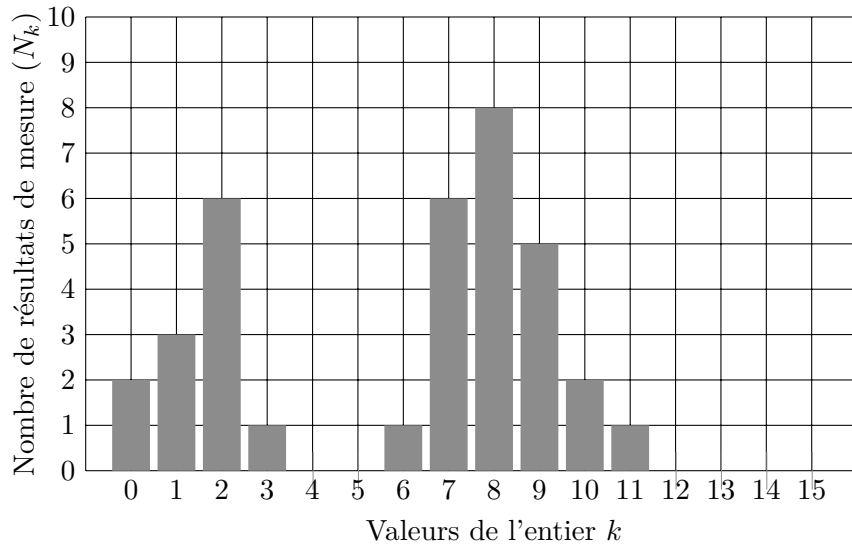


Figure 6 : dispersion des résultats de mesure sur l'impulsion

Conclusion :

On ne peut jamais prévoir à l'avance le résultat d'une mesure de la position X ou de l'impulsion P_x d'une particule microscopique. Tout ce que l'on peut connaître est la probabilité d'obtenir tel ou tel résultat. La mécanique quantique fournit tous les outils pour calculer les probabilités mais c'est la seule information qu'il nous est possible de connaître.

8) Inégalité de Heisenberg

Il est possible de démontrer l'important résultat suivant (que nous allons bien sûr admettre) reliant les indéterminations quantiques $\Delta X(t)$ et $\Delta P_x(t)$, évaluée au même instant t : il s'agit de *l'inégalité de Heisenberg*.

Inégalité de Heisenberg

Les indéterminations quantiques sur la position et sur l'impulsion vérifient à tout instant t l'inégalité :

$$\Delta X(t) \times \Delta P_x(t) \geq \frac{\hbar}{2}$$

II Évolution de la fonction d'onde dans l'espace et le temps

1) Équation de Schrödinger

On admet que pour une particule non relativiste ($v \ll c$) de masse m placée dans un champ de forces dérivant de l'énergie potentielle $V(M)$, la fonction d'onde obéit à l'équation suivante :

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(M)\Psi}$$

avec :

- $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ constante de Planck réduite : $\hbar = 1,06 \times 10^{-34}$ J.s
- $\Delta \Psi$: laplacien de Ψ . En coordonnées cartésiennes :

$$\Delta \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}$$

Remarques :

2) Théorème de superposition. Indétermination de phase

Comme l'équation de Schrödinger est **linéaire**, si Ψ_1 et Ψ_2 sont deux solutions de cette équation alors toute combinaison linéaire :

$$\boxed{\psi = \alpha_1 \Psi_1 + \alpha_2 \Psi_2, (\alpha_1, \alpha_2) \in \mathbb{C}^2}$$

est aussi solution. C'est le *théorème de superposition*. Ψ est appelé *état quantique superposé* des états quantiques Ψ_1 et Ψ_2 .

Indétermination de la phase :

Si Ψ est une solution de l'équation de Schrödinger, alors pour toute constante réelle $\theta \in \mathbb{R}$, $\psi' = e^{i\theta} \Psi$ est aussi solution. De plus comme :

$$\forall M, \forall t, |\Psi(M, t)|^2 = |\Psi'(M, t)|^2$$

ψ et ψ' conduisent à la même densité de probabilité de présence de la particule et donc a fortiori aux mêmes résultats concernant la valeur moyenne $\langle X \rangle(t)$ et l'écart-type $\Delta X(t)$ sur la position.

Ces deux fonctions d'onde sont donc **équivalentes** en ce qui concerne les prévisions probabilistes de la mécanique quantique (on peut utiliser indifféremment ψ ou ψ').

3) Influence d'un décalage de l'origine de l'énergie potentielle

L'énergie potentielle n'est définie qu'à une constante près : si $V(M)$ est une énergie potentielle, alors $V'(M) = V(M) + V_0$ où V_0 est une constante convient aussi. Comme $V(M)$ intervient dans l'équation de Schrödinger, comment le changement d'énergie potentiel influe-t-il sur les solutions Ψ ?

4) Densité de courant de probabilité

Il existe un champ vectoriel $\vec{j}(M, t)$ appelé **densité de courant de probabilité**, tel qu' en tout point M et à chaque instant t on ait :

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0$$

Il s'agit de *l'équation locale de conservation de la probabilité*. C'est une équation analogue à l'équation locale de conservation de la charge électrique en électromagnétisme. On peut poser les analogies suivantes :

Électromagnétisme	Mécanique quantique
Densité de charge ρ	Densité de probabilité $ \Psi ^2$
Densité de courant \vec{j}	Densité de courant de proba. \vec{j}
$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0$	$\frac{\partial \Psi ^2}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0$

L'expression de la densité de courant de probabilité est :

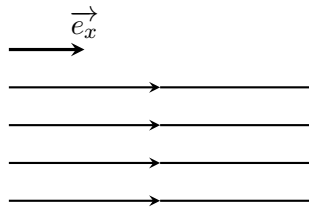
$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \Psi \overrightarrow{\operatorname{grad}} \Psi^* - \Psi^* \overrightarrow{\operatorname{grad}} \Psi \right\}$$

Preuve :

III Énergie et quantité de mouvement en mécanique quantique

1) Approche historique

Considérons un faisceau de lumière monochromatique (pulsation ω , fréquence $\nu = \omega/2\pi$) issu d'une source ponctuelle S située à l'infini ou bien au foyer objet d'une lentille convergente. Ce faisceau est donc constitué d'un ensemble de rayons parallèles. On suppose pour simplifier que le milieu de propagation est le vide.



Description ondulatoire :

Description corpusculaire (Einstein 1905) :

Le faisceau lumineux est constitué d'un ensemble de particules ponctuelles de masse nulle (photons), de vitesse $\vec{c} = c\vec{e}_x$, d'énergie $E = \hbar\omega$ et de quantité de mouvement (aussi appelée impulsion) $\vec{p} = \hbar\vec{k}$.

Remarque :

En relativité restreinte une particule de masse nulle peut avoir une quantité de mouvement $\vec{p} \neq \vec{0}$.

Faits expérimentaux confirmant cela :

- effet photoélectrique (voir cours MPSI)
- effet Compton : diffusion des rayons X par les électrons. On traite l'exemple sur feuille à part.

2) Postulat de Planck-Einstein

La mécanique quantique reprend les idées précédentes et les étend à toute particule élémentaire de masse m de la façon suivante :

P₃ Postulat de Planck-Einstein

Si la fonction d'onde d'une particule :

1. est de la forme $\Psi(M, t) = \varphi(M) e^{-i\omega t}$ où $\varphi(M)$ ne dépend que des coordonnées d'espace, alors l'énergie de la particule est parfaitement définie et elle vaut :

$$E = \hbar\omega$$

2. est de la forme $\Psi(M, t) = f(t) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ où $f(t)$ ne dépend que du temps, alors l'impulsion de la particule est parfaitement définie et elle vaut :

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}$$

Attention! Dans le cas où la particule n'est pas un photon $\|\vec{k}\| \neq \frac{\omega}{c}$ (voir plus loin).

Exercice :

1. Dans le cas d'une onde de De Broglie, n'y a-t-il pas une contradiction avec le principe d'indétermination de Heisenberg? Une telle onde a-t-elle un sens physique?
2. Calculer le vecteur densité de courant de probabilité \vec{j} pour une onde de De Broglie.

3) États stationnaires quantiques

a) Définition

Définition. État stationnaire quantique

On appelle *état stationnaire quantique* toute fonction d'onde Ψ solution de l'équation de Schrödinger qui s'écrit sous la forme :

$$\Psi(M, t) = f(t) \varphi(M)$$

Remarque :

C'est une définition analogue à celle d'une onde stationnaire en physique ondulatoire mais avec une **différence fondamentale** : φ et f sont à valeurs complexes.

Dans la suite un état stationnaire quantique sera noté Ψ_{stat} . La décomposition $\Psi_{\text{stat}} = f(t)\varphi(M)$ n'est pas unique. En effet :

b) Énergie associée à un état stationnaire quantique

Important. Calculs sur feuille à part

c) Équation de Schrödinger indépendante du temps. Hamiltonien

La partie spatiale $\varphi(M)$ de l'état stationnaire quantique vérifie l'équation aux dérivées partielles suivante :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \varphi}{\varphi} + V(M) = C = E$$

d'où :

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi + V(M) \varphi = E \varphi}$$

On peut la mettre sous la forme :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(M) \right\} \varphi(M) = E \varphi(M)$$

Définition. Opérateur hamiltonien

L'opérateur :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(M)$$

est appelé *opérateur hamiltonien* de la particule. Un état stationnaire $\Psi_{\text{stat}} = \varphi(M)e^{-iEt/\hbar}$ d'énergie E est tel que :

$$H\varphi(M) = E\varphi(M)$$

Remarque :

4) Espace vectoriel des états quantiques

On appelle \mathcal{E} l'espace vectoriel des applications de $\mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{C}$, $(x, y, z, t) \mapsto \Psi(x, y, z, t)$ qui sont de classe C^∞ par rapport aux variables d'espace et de temps.

\mathcal{E} est l'espace vectoriel des états quantiques.

Remarque :

Dans cet espace vectoriel \mathcal{E} on appelle :

- L^2 l'ensemble des applications de carré sommable. L^2 est un sous-espace vectoriel de \mathcal{E} .
- S l'ensemble des solutions de l'équation de Schrödinger. S est aussi un sous-espace vectoriel de \mathcal{E} .

D'un point de vue mathématique, l'hamiltonien H est un *endomorphisme* de \mathcal{E} . En effet :

5) Théorème du minimum d'énergie

En mécanique classique l'énergie mécanique E d'une particule placée dans un champ de forces dérivant de l'énergie potentielle $V(M)$ vérifie

$$E = E_C + V(M) = \frac{1}{2}mv^2 + V(M)$$

E est une *constante fixée par les conditions initiales*. Si de plus on suppose que $V(M)$ admet un minimum absolu en M_0 , c'est à dire si :

$$\forall M, V(M) \geq V_{\min}$$

alors :

Théorème du minimum d'énergie en mécanique quantique

Si l'énergie potentielle $V(M)$ admet un minimum absolu V_{\min} , c'est à dire si :

$$\forall M, V(M) \geq V_{\min}$$

alors toute énergie E , c'est à dire toute valeur propre de l'hamiltonien H vérifie l'inégalité stricte :

$$E > V_{\min}$$

Remarque :

En mécanique quantique on ne peut jamais avoir $E = V_{\min}$.

6) Exemple de la particule libre

En mécanique classique une particule est dite libre lorsqu'elle est *sans aucune interaction avec le reste de l'univers*.

On peut très bien voir cela en disant que la particule est soumise à une force nulle de la part du reste de l'univers : $\vec{F} = \vec{0}$, quelle que soit la position de la particule et pour tout t . À ce champ de forces nul on peut donc associer l'énergie potentielle $V(M)$ telle que :

Définition. Particule libre en mécanique quantique

En mécanique quantique une particule est dite **libre** si et seulement si elle est sans interaction avec le reste de l'univers. On caractérise cela par une énergie potentielle nulle :

$$\forall M, V(M) = 0$$

Conséquences :

Exemple d'un état stationnaire d'énergie E d'une particule libre.

7) Notions élémentaires sur les états superposés

Reprenons l'exemple de l'exercice précédent. La fonction d'onde de la particule s'écrit :

$$\Psi(x, t) = A e^{ikx} e^{-iEt/\hbar} + B e^{-ikx} e^{-iEt/\hbar}$$

Remarques :

Exercice de cours (sur feuille à part) :

On prend un modèle unidimensionnel avec $\Psi = \Psi(x, t)$ et on considère une particule libre.

- 1) Expliciter tous les états stationnaires quantiques associés à une énergie E donnée.
- 2) Montrer que le degré de dégénérescence de E est égal à deux : $g(E) = 2$.

Bilan de ce chapitre

Points du cours à connaître :

- Énergie et impulsion d'un photon. Effet photélectrique.
- Interprétation probabiliste de la fonction d'onde : $\|\Psi\|^2 =$ densité de probabilité de présence. Normalisation de la probabilité. Définition de $\langle X \rangle$, $\langle X^2 \rangle$ et ΔX . Inégalité de Heisenberg : $\Delta X \times \Delta P_x \geq \hbar/2$
- Équation de Schrödinger à savoir donner.
- Savoir que si $\Psi = \varphi(M)e^{-i\omega t}$ alors l'énergie de la particule est $E = \hbar\omega$. Si $\Psi = f(t)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ (onde de De Broglie) alors l'impulsion de la particule est parfaitement définie et vaut $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Dans ce dernier cas on peut introduire la longueur d'onde de De Broglie :

$$\lambda_D = \frac{2\pi}{\|\vec{k}\|} = \frac{2\pi\hbar}{\|\vec{p}\|} = \frac{h}{\|\vec{p}\|}$$

- Densité de courant de probabilité \vec{j} : dans le cas d'une onde de De Broglie : $\vec{j} = \frac{\hbar\vec{k}}{m}|\Psi|^2 = \frac{\vec{p}}{m}|\Psi|^2$. $\Phi(\vec{j}/S) dt$ est la probabilité pour que la particule traverse la surface S entre t et $t + dt$.
- Définir un état stationnaire quantique. Connaître toute la démonstration conduisant à $f(t) = e^{-i\omega t}$. Énergie de l'état stationnaire. Connaître l'équation de Schrödinger indépendante du temps.
- Connaître le théorème du minimum d'énergie.

Exercices à travailler :

- En priorité : 1, 2, 3, 5 et 7 + Les 3 exercices avec marche, barrière et puit de potentiel.
- S'il y a le temps : 6, 8 et 9