Introduction à la physique quantique et particule quantique libre

Table des matières

Introduction

Ce chapitre est construit sur la mécanique ondulatoire de Schrödinger [1], conciliant à la fois la vision corpusculaire et ondulatoire de la matière, et a pour but de résoudre complètement des exemples simples mais fondamentaux pour la bonne compréhension de phénomènes plus complexes.

Afin de désigner les **particules quantiques**, nous utiliserons plus souvent le terme générique de **quantons**, qui pourra faire référence à des électrons, ou encore des atomes (les photons sont souvent à traiter à part, notamment car ils n'ont pas de masse [2]). Leur description est impossible avec la physique classique et nécessite de faire appel à une interprétation ondulatoire et probabiliste.

I Fonction d'onde et équation de Schrödinger

I.1 Fonction d'onde d'une particule quantique sans spin

Définition

L'état physique d'un quanton est parfaitement précisé par une *fonction d'onde* complexe $\underline{\Psi}(M,t)$ qui représente une *amplitude de probabilité* d'état. Ainsi, $|\underline{\Psi}|^2$ représente une *densité de probabilité* d'état.

1. Il existe d'autres approches, plus complexes, reposant sur une modélisation matricielle, formulée à partir des travaux d'Hamilton et Heisenberg.
2. Ce sont les seules particules sans masse à ce jour. Il a été montré en 1998 que les neutrinos avaient finalement une masse très faible.

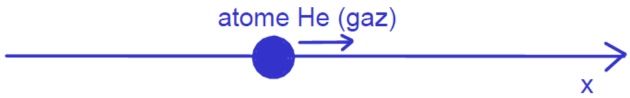
Remarque

> *L'interprétation probabiliste de la fonction d'onde par Born en 1926 n'intervient qu'après son introduction par Schrödinger en 1923 pour décrire les propriétés des ondes de De Broglie. Cette vision déroutante de la réalité est loin d'avoir fait l'unanimité à ses débuts ; Einstein aurait par exemple fait la réplique célèbre suivante : "Dieu ne joue pas aux dés".*

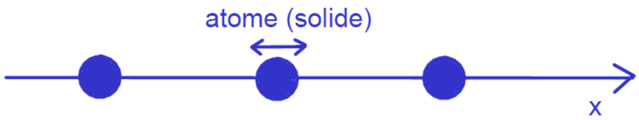
Conformément au programme, nous nous limiterons aux particules sans spin (c'est à dire sans degré de liberté interne), dans un cas unidimensionnel, c'est à dire que nous allons étudier un quanton se déplaçant selon la direction x.

Exemples :

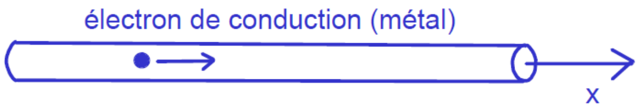
- atome sans spin au sein d'un gaz (He par exemple, puisque sa configuration électronique est $[He] = 1s^2$) ;



- atome vibrant au cœur d'un matériau ou dans une molécule, soumis aux forces des atomes voisins ;



- électron libre se déplaçant dans un fil conducteur (en oubliant le spin !).



Postulat de Born

La probabilité de présence d'un quanton à l'instant t entre les abscisses x et $x + dx$ s'écrit :

$$\mathrm{d}P = |\underline{\Psi}(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x$$

La condition de normalisation s'écrit sur le domaine $\mathcal{D}$ accessible [a] :

$$\int_{\mathcal{D}} |\underline{\Psi}(M,t)|^2 \,\mathrm{d}x = 1$$

a. On peut en déduire directement qu'à une dimension, la fonction d'onde est homogène à $L^{-1/2}$

Remarque

> *$\underline{\Psi}(x,t)$ contient **toute** l'information disponible sur le quanton. Il n'y a pas d'autre élément dans le formalisme quantique permettant de savoir, avant de faire la mesure, où une manifestation corpusculaire va être détectée [a].*
>
> *La conséquence directe est qu'on ne peut plus parler de **trajectoire** au sens classique pour caractériser la position d'un quanton au cours du temps : celui-ci est **délocalisé** jusqu'à ce qu'on mesure sa position.*
>
> *a.* On dit qu'il n'y a pas de *variables cachées* ; c'est l'objet du paradoxe EPR et des inégalités de Bell.

Afin de mesurer la densité de probabilité de présence $|\underline{\Psi}(M,t)|^2$, il faut mesurer la position de N particules quantiques identiques, indépendantes, dans le même état quantique représenté par la fonction d'onde $\psi(x,t)$ et dresser un histogramme des valeurs de positions mesurées. Le passage au continu permet de reconstituer la répartition de $|\underline{\Psi}(M,t)|^2$ comme le montre la figure ci-dessous.

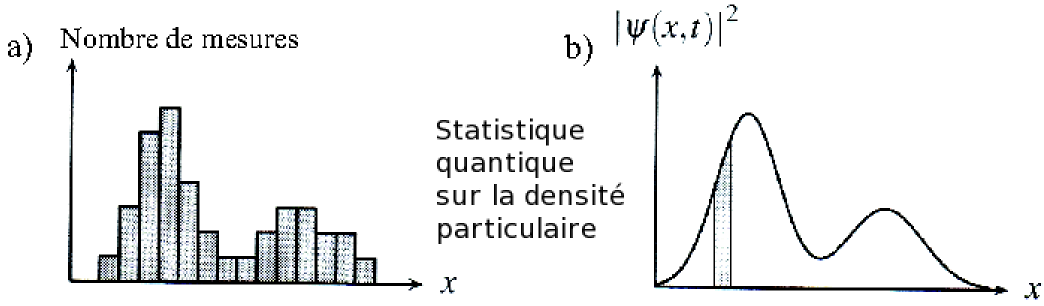


FIGURE 1 – *Exemple de statistique quantique sur la densité particulaire. a) Distribution des positions mesurées de N particules quantiques identiques. La hauteur cumulée des barres de l'histogramme est égale au nombre N de particules. b)Densité de probabilité de présence correspondante. L'aire hachurée correspond à la probabilité de présence* $\mathrm{d}P(x,t)$ *entre* x *et* $x+\mathrm{d}x$ *à l'instant* t. *L'aire totale sous la courbe est égale à l'unité.*

Propriété

La fonction d'onde est définie à un facteur de phase près, et on admettra que les fonctions d'onde $\underline{\psi}(x,t)$ et $\underline{\psi}(x,t)e^{i\phi}$ représentent le même état physique d'une particule [a].

a. Attention, la phase relative aura néanmoins une importance si on considère une superposition de deux particules (cf cas des trous d'Young)

Dans la suite du cours, nous ne soulignerons plus la fonction d'onde et nous la noterons simplement $\psi(x,t)$ mais on n'oubliera pas qu'elle est à valeurs complexes.

I.2 Équation de Schrödinger

a) Énoncé

La fonction d'onde introduite par De Broglie et interprétée en terme probabiliste par Born est gouvernée par une équation introduite heuristiquement, à la suite de tâtonnements, d'essais et d'erreurs, par des arguments physiques et des analogies, par Schrödinger en 1926.

Eq. de Schrödinger

Une particule matérielle non relativiste sans spin placée dans un champ de force dérivant d'une énergie potentielle $V(M,t)$ admet pour équation dynamique de sa fonction d'onde :

dans laquelle les opérateurs agissant sur la fonction d'onde sont associés à des grandeurs énergétiques. On rappelle que la constante de Planck est définie par : $h = 6,63\times 10^{-34}$ $J.s$ et $\hbar = h/2\pi = 1,05\times 10^{-34}$ $J.s$.
Dans le cadre unidimensionnel du programme, avec une énergie potentielle indépendante du temps, on notera :

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

Remarque

Ce postulat est validé par l'expérience jusqu'à une précision déconcertante : le facteur de Landé de l'électron (cf DM sur la mécanique quantique), prédit par la mécanique quantique, s'identifie par exemple à la mesure expérimentale avec douze chiffres significatifs !

b) Propriétés de l'équation de Schrödinger

- **Linéarité** : on pourra donc appliquer le principe de superposition pour les amplitudes de probabilité.
- **Ordre 1 par rapport au temps** : la connaissance de ψ à un instant initial donné suffit à déterminer toute son évolution ultérieure.
- **Caractère physique des solutions** : d'après le principe de correspondance de Bohr, on écartera toutes les solutions qui ne se confondent pas avec les solutions classiques dans la limite pour laquelle la théorie classique est valable.
- **Propriétés de la fonction d'onde** : pour que l'équation soit définie sur un domaine $\mathcal{D}$, il faut nécessairement que $\psi(x,t)$ soit $\mathcal{C}^1$ sur $\mathcal{D}$ en tout point x pour lequel le potentiel $V(x)$ est défini et borné [3]. De plus, on pourra utiliser que la fonction d'onde, en tant qu'amplitude de probabilité, est nécessairement bornée à cause de la condition de normalisation.

c) Interprétation ondulatoire l'équation de Schrödinger

Comme l'équation de Schrödinger est linéaire, on peut essayer d'y injecter une OPPH en complexe, "pour voir". On pose alors :

$$\psi(x,t) = \psi_0 e^{i(kx-\omega t)}$$

Remarque

- *Contrairement à ce que nous avions constaté en électromagnétisme, il n'est cette fois pas possible de choisir n'importe quelle convention de signe pour la notation complexe. En effet, $\psi(x,t) = \psi_0 e^{-i(kx-\omega t)}$ aurait conduit à une énergie totale négative $-\hbar\omega = \dfrac{p^2}{2m} + V < 0$. Or, d'après le principe de correspondance de Bohr, qui doit permettre de retrouver la physique classique dans les cas simples, on élimine cette seconde convention de signe. Il n'y a qu'**une seule convention possible** pour la notation complexe en mécanique quantique.*
- *On notera que la méthode utilisée ici est l'inverse de la méthode utilisée par Schrödinger, qui a essayé, à partir de la relation de De Broglie et des relations de Planck-Einstein, de trouver une équation mécanique décrivant les ondes de matière.*

3. Dans le cas où $V(x)$ présente une discontinuité infinie, $\dfrac{\partial \psi}{\partial x}$ n'est plus continue.

d) Principe de superposition et expérience des fentes d'Young

Revenons sur l'expérience des fentes d'Young - avec une source lumineuse ou des particules matérielles - en nous appuyant sur l'interprétation probabiliste de Born.

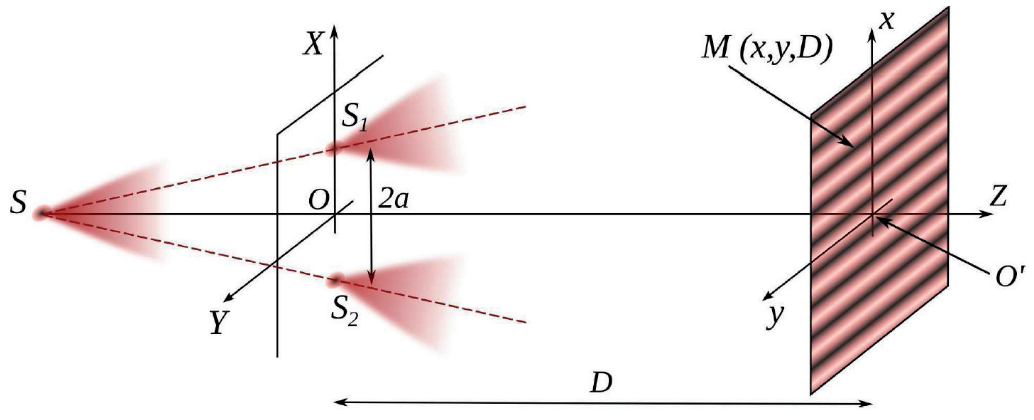


FIGURE 2 – *Dispositif des trous d'Young.*

Si seul le trou supérieur est ouvert, alors la probabilité qu'un quanton parvienne sur un élément de surface dS infinitésimal placé en M sur l'écran à l'instant t est :

$$\mathrm{d}P_1(M,t) = |\psi_1(M,t)|^2\,\mathrm{d}S \qquad \text{avec} \qquad \iint_{M\in\text{écran}} \mathrm{d}P_1(M,t) = \iint_{M\in\text{écran}} |\psi_1(M,t)|^2\,\mathrm{d}S = 1$$

où ψ_1 est la fonction d'onde associée à un quanton lorsque seul le trou supérieur est ouvert.

Si on envoie les quantons avec une intensité faible, on verra se former une figure sur l'écran, détection après détection, qui finit par donner une visualisation de la loi $\mathrm{d}P_1$ en fonction de M qui est **uniforme**. Il en va de même avec l'autre trou seul ouvert, en utilisant la notation ψ_2, fonction d'onde d'un quanton lorsque seul le trou inférieur est ouvert.

À présent, on ouvre les deux trous et la probabilité devient

$$\mathrm{d}P(M,t) = |\psi(M,t)|^2\,\mathrm{d}S$$

Or, on sait que l'on doit obtenir une figure d'interférences se construisant détection après détection. Par analogie avec la superposition des amplitudes d'ondes cohérentes en optique et les deux trous jouant des rôles symétriques, on peut donc proposer la fonction d'onde totale

$$\psi(M,t) = \alpha\,[\psi_1(M,t) + \psi_2(M,t)]$$

où α est un nombre complexe venant de la normalisation de la loi de probabilité. Alors, la probabilité de détection sur l'écran devient

$$\mathrm{d}P(M,t) = |\alpha|^2\,|\psi_1(M,t) + \psi_2(M,t)|^2\,\mathrm{d}S$$

soit

$$\mathrm{d}P(M,t) = |\alpha|^2\left[|\psi_1(M,t)|^2 + |\psi_2(M,t)|^2 + \psi_1(M,t)\psi_2^*(M,t) + \psi_1^*(M,t)\psi_2(M,t)\right]\mathrm{d}S$$

$$\text{d'où} \qquad \mathrm{d}P(M,t) = |\alpha|^2\,[\mathrm{d}P_1(M,t) + \mathrm{d}P_2(M,t) + \mathrm{d}P_{12}(M,t)]$$

où les termes croisés attestent de la présence d'**interférences entre ondes de probabilité**. On pose

$$\psi_1(M,t) = |\psi_1(M,t)|e^{j\varphi_1(M)} \qquad \text{et} \qquad \psi_2(M,t) = |\psi_2(M,t)|e^{j\varphi_2(M)} \qquad \text{et} \qquad \Delta\varphi(M) = \varphi_2(M) - \varphi_1(M)$$

le déphasage en M entre les ondes de probabilité.

Finalement, on obtient bien une loi qui correspond aux observations : les détections se répartissent suivant une loi de probabilité dont le profil est celui de la figure d'interférences à deux ondes de Young.

$$\boxed{\mathrm{d}P(M,t) = |\psi(M,t)|^2\,\mathrm{d}S = |\alpha|^2\left[\mathrm{d}P_1(M,t) + \mathrm{d}P_2(M,t) + 2\sqrt{\mathrm{d}P_1(M,t)\mathrm{d}P_2(M,t)}\cos\Delta\varphi(M)\right]}$$

En construisant la figure photon par photon, on voit que le profil lumineux donne accès, à une constante multiplicative près, à la densité de probabilité d'impact d'un photon sur l'écran.

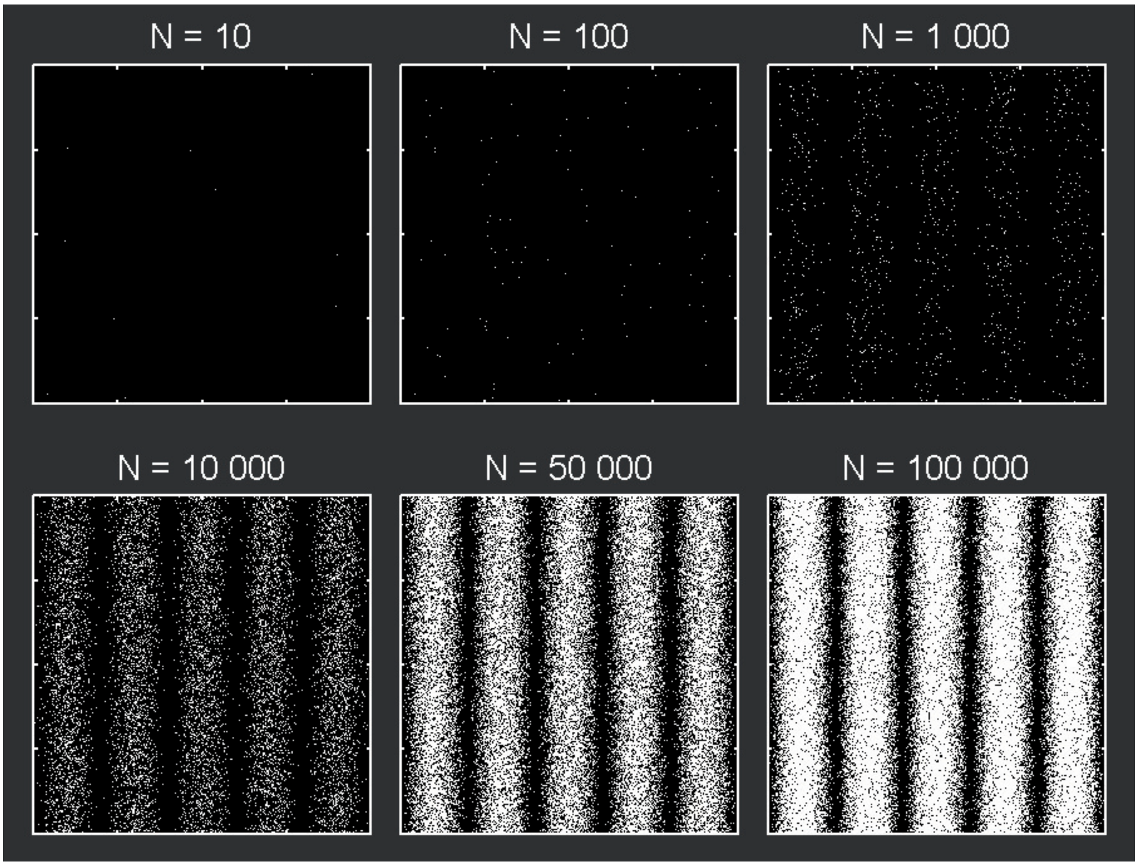


Figure 3 – *Construction des franges d'interférence dans l'expérience des trous d'Young, photon par photon.*

I.3 États stationnaires de l'équation de Schrödinger

a) Définition

Définition

En mécanique quantique, on appelle *état stationnaire* un état du système caractérisé par une fonction d'onde pour laquelle les variables de temps et d'espace sont découplées :

$$\psi(x,t) = \varphi(x) f(t)$$

où φ et f sont a priori deux fonctions à valeurs complexes.

Remarque

On notera que dans le cadre de la physique classique, une grandeur est stationnaire seulement si on peut l'écrire comme le produit de deux fonctions réelles. Cette différence fondamentale peut être illustrée simplement sur l'exemple de la fonction $a(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ qui correspond à une onde progressive[a] *en physique classique. Une telle onde reste progressive en mécanique quantique, mais décrit l'évolution d'un état stationnaire !*

[a] On doit en fait l'écrire sous la forme réelle $a(x,t) = A\cos(kx - \omega t)$ qui n'est pas factorisable.

b) Solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger

Propriété

Les *états stationnaires* ψ_{es} de l'équation de Schrödinger dans le cas d'une énergie potentielle *indépendante* du temps s'écrivent, en notant E leur énergie :

$$\psi_{es}(x,t) = \varphi(x)e^{-\dfrac{iEt}{\hbar}}$$

où la partie spatiale $\varphi(x)$ de la fonction d'onde vérifie l'*équation de Schrödinger indépendante du temps*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$$

c) Densité de probabilité d'un état stationnaire

Nous avons obtenu qu'un état stationnaire pouvait s'écrire sous la forme $\psi_{es}(x,t) = \varphi(x)e^{-iEt/\hbar}$, de sorte que la densité de probabilité s'écrit :

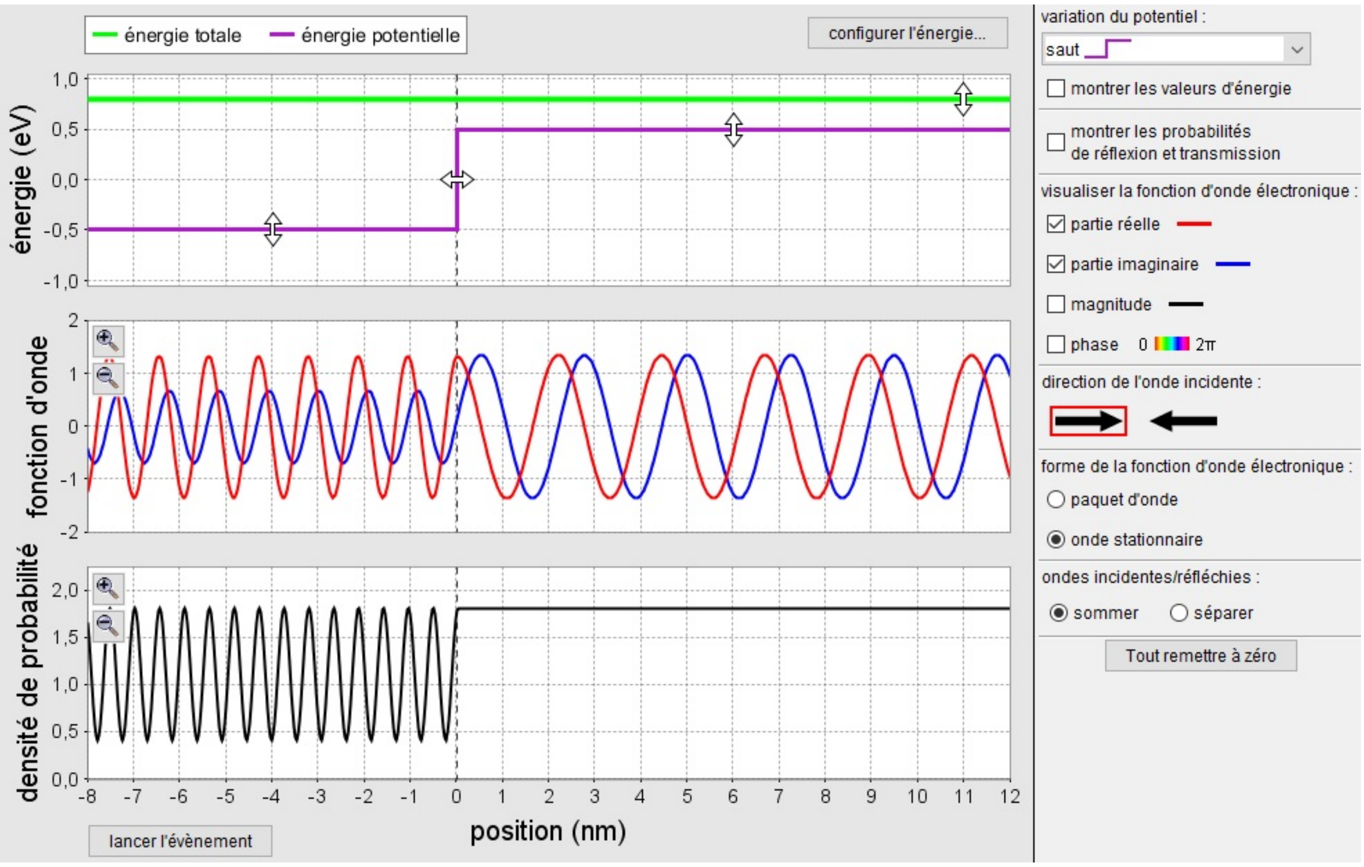
$$|\psi(x,t)|^2 = |\varphi(x)|^2$$

Propriété

La densité de probabilité de présence d'un état stationnaire est indépendante du temps

Exemple

On peut très bien visualiser le fait que la fonction d'onde dépend du temps, mais que la densité de probabilité est indépendante du temps dans le cas particulier de la marche de potentiel, par exemple avec l'animation suivante : https ://phet.colorado.edu/fr/simulation/legacy/quantum-tunneling.



d) Intérêt des états stationnaires

Au même titre que les modes propres d'une onde sur une corde fixée à ses deux extrémités constitue une base des vibrations pouvant exister sur la corde, on admettra le théorème suivant [4] :

Base des états

Les états stationnaires ψ_{es} sont linéairement indépendants entre eux et constituent une base des fonctions d'onde $\psi(M,t)$ solutions de de l'équation de Schrödinger pour une énergie potentielle indépendante du temps. Pour un spectre discret en énergie, on peut donc écrire :

$$\psi(x,t) = \sum_n a_n \varphi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

où a_n sont des coefficients complexes.

4. Ce théorème appelé "théorème spectral" dont la démonstration hors programme repose sur les notions d'algèbre linéaire vues en maths (voir démonstration ci-dessous).

Commençons par définir l'opérateur Hamiltonien $\widehat{H}$ par

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

Comme nous l'avons vu précédemment, celui-ci permet de déterminer l'énergie du système (énergie cinétique + énergie potentielle), et on admettra que $\widehat{H}$ est donc une "observable", c'est-à-dire un opérateur hermitique (ou auto-adjoint $\widehat{H}^\dagger = \widehat{H}$). Il est donc diagonalisable dans une base orthonormée et à valeurs propres réelles.

L'équation de Schrödinger indépendante du temps peut maintenant s'écrire avec l'opérateur Hamiltonien :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\varphi(x) = E\varphi(x) \qquad \Rightarrow \qquad \widehat{H}\varphi = E\varphi$$

Ainsi, la recherche des états stationnaires et de leur énergie revient à diagonaliser l'opérateur $\widehat{H}$. L'ensemble des énergies E_n et des parties spatiales des états stationnaires $\varphi_n(x)$ forment respectivement les valeurs propres et les états propres de l'opérateur Hamiltonien tels que

$$\widehat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n$$

Comme l'expression complète des états stationnaires s'écrit $\psi_n(x,t) = \varphi_n(x)\exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right)$, l'équation précédente multipliée par la partie temporelle $\exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right)$ permet d'obtenir :

$$\widehat{H}\psi_n = E_n\psi_n$$

De même que précédemment, cela signifie que les énergies E_n et les états stationnaires $\psi_n(x,t)$ forment respectivement les valeurs propres et une base des états propres de l'opérateur Hamiltonien. Toute solution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps $\psi(x,t)$ peut donc s'écrire

$$\psi(x,t) = \sum_n a_n\psi_n(x,t) \qquad \text{soit} \qquad \psi(x,t) = \sum_n a_n\varphi_n(x)\exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right)$$

et à $t=0$, cette décomposition devient :

$$\psi(x,0) = \sum_n a_n\varphi_n(x) \qquad \text{avec } a_n \in \mathbb{C}$$

Finalement, si on connait la fonction d'onde à l'instant initial à travers sa décomposition sur les parties spatiales des états stationnaires par la détermination des coefficients a_n, on la connaît à tout instant ultérieur sans effectuer aucun calcul supplémentaire. C'est une des raisons pour lesquelles on cherche souvent à calculer les états stationnaires indépendants du temps au lieu de résoudre directement l'équation de Schrödinger temporelle.

II Particule libre

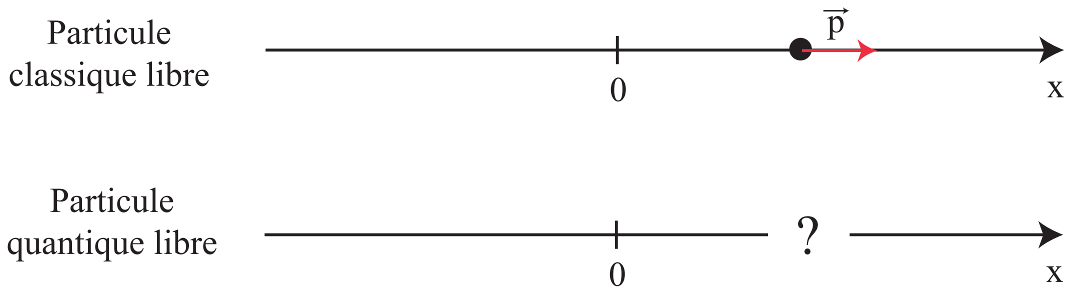
II.1 Définition

Définition

Une particule quantique est dite *libre* si elle évolue dans le vide sans interaction, c'est à dire qu'elle vérifie l'équation de Schrödinger avec $V(x) = 0$ (ou $V(x) = V_0$ car le potentiel est défini à une constante près) :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}$$

Dans le cadre du programme, une particule libre peut se déplacer librement sur l'axe x entre $-\infty$ et $+\infty$.



II.2 États stationnaires d'une particule quantique libre

Propriété

États stationnaires de quantons libres d'énergie $E = \hbar\omega$ et d'impulsion $\overrightarrow{p} = \hbar\overrightarrow{k}$ (relations de Planck-Einstein) :

$$\psi(x,t) = Ae^{-i(\omega t - kx)} + Be^{-i(\omega t + kx)} \qquad \textbf{ou} \qquad \psi(x,t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)} + Be^{-\frac{i}{\hbar}(Et+px)}$$

On retrouve la dualité onde-corpuscule : interprétation ondulatoire à gauche et interprétation corpusculaire à droite.

L'expression de la fonction d'onde d'une particule libre correspond à la superposition de deux ondes planes, progressives, monochromatiques, se propageant dans des directions opposées à la vitesse de phase $v_\varphi = \dfrac{\omega}{k} = \dfrac{E}{p}$.

Remarque

Attention :

- *comme nous l'avions expliqué lors de la définition d'un état quantique stationnaire, les fonctions d'ondes que nous venons de qualifier ici d'ondes progressives sont des états quantiques stationnaires...*
- *la relation de dispersion ne correspond pas ici à $k = \dfrac{\omega}{c}$ (valable seulement pour un photon, pour lequel $v_\varphi = c$, et pour lequel on retrouve bien $E = pc = \frac{hc}{\lambda} = h\nu$ - voir tableau récapitulatif ensuite).*

II.3 Quel sens physique peut-on donner à une onde progressive de la forme $\psi^+(x,t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)} = Ae^{-i(\omega t-kx)}$?

▷ *Interprétation pour décrire une seule particule quantique* : impossible

On voit immédiatement que la densité de probabilité de présence $\left|\psi^+(x,t)\right|^2 = |A|^2$ est uniforme dans l'espace.

Si une particule unique était représentée par une telle fonction d'onde, elle serait **délocalisée** dans tout l'espace accessible. Ceci est impossible car ψ^+ n'est **pas normalisable**. En effet, $\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi^+(x,t)\right|^2 dx \to \infty$, de sorte qu'une onde plane n'a **pas de réalité physique prise seule**[5].

▷ *Interprétation comme un maillon d'un paquet d'onde décrivant une seule particule* : possible

Néanmoins, nous avons vu que les états stationnaires pouvaient servir de base à toutes les solutions libres de l'équation de Schrödinger. Cette dernière étant linéaire, le principe de superposition s'applique, et ces ondes planes monochromatiques pourront donc servir, exactement comme dans la physique des ondes, de maillon élémentaire permettant de reconstituer la fonction d'onde d'une particule quantique par un **paquet d'onde** (voir section suivante).

▷ *Interprétation en terme de statistique quantique pour un flux continu de particules* : possible

L'expression de ψ reste néanmoins cohérente avec la situation physique suivante : un flux ininterrompu, donc uniforme, de protons d'énergie E produits par exemple par un cyclotron serait bien décrit par la fonction d'onde : $\psi^+(x,t) = Ae^{-i(\omega t-kx)}$ avec :

$$\omega = \qquad\qquad \text{et} \qquad k =$$

II.4 Représentation d'une particule quantique libre par un paquet d'onde

Nous allons donner un sens concret à l'inégalité de Heisenberg, dont on rappelle l'expression dans l'encadré ci-dessous, à partir de la notion de **paquet d'onde**, déjà introduite en physique des ondes.

Inégalité de Heisenberg

L'inégalité spatiale de Heisenberg (ou relation d'indétermination) s'écrit :

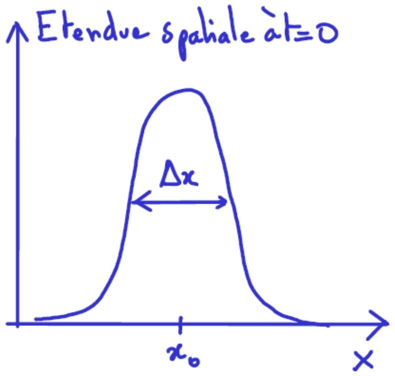
$$\Delta x \Delta p \gtrsim \frac{\hbar}{2} \qquad \textbf{ou (avec } p = \hbar k\textbf{)} \qquad \Delta x \Delta k \gtrsim \frac{1}{2}$$

où Δx (de même pour Δp et Δk) est défini de manière statistique par :

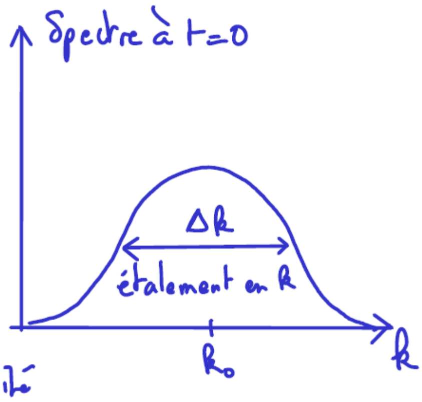
$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} \qquad \textbf{avec} \qquad \begin{cases} \langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x dP(x) = \int_{-\infty}^{\infty} x\left|\psi(x)\right|^2 dx \\ \langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 dP(x) = \int_{-\infty}^{\infty} x^2\left|\psi(x)\right|^2 dx \end{cases}$$

5. On retrouve comme en électromagnétisme que l'extension spatiale et l'extension temporelle d'une onde plane monochromatique sont infinies, entraînant des problèmes de normalisation. En restreignant le domaine d'étude et en normalisant sur cet espace, on peut néanmoins lui donner un contenu physique afin de faire des approches simplifiées de certains problèmes.

Représentations d'un paquet d'onde



$$\boxed{\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}}$$

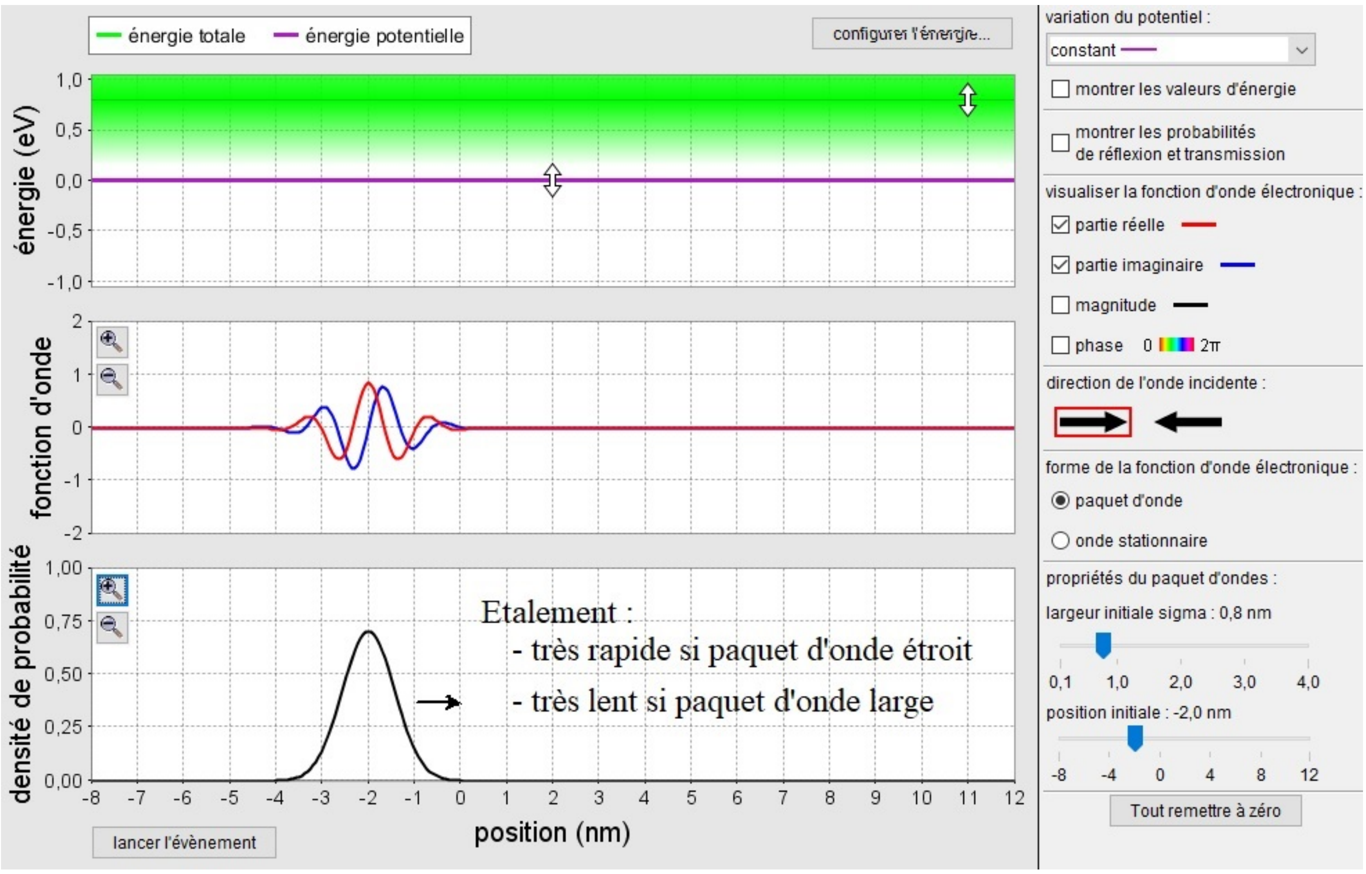


Il s'agit d'une égalité stricte dans le cas d'une Gaussienne, et on pourra supposer l'égalité vérifiée également pour les calculs d'ordre de grandeur dans les exercices.

Evolution temporelle du paquet d'onde

→ On utilise v_φ et v_g ⇒ besoin de déterminer la relation de dispersion $k = f(\omega)$

Le paquet d'onde se dispersera donc lors de sa propagation (voir animation suivante : *https://phet.colorado.edu/fr/simulation/legacy/quantum-tunneling*).



Remarque

Ordres de grandeurs *: la modélisation complète par un paquet d'onde permet de calculer le temps caractéristique d'étalement du paquet d'onde (temps au bout duquel son étendue spatiale a doublé) :*

- ***Pour un électron***, $t_0 \simeq 10^{-16}$ *s. Cette durée est du même ordre de grandeur que la période de révolution sur une orbite du modèle de Bohr. Cela montre que l'hypothèse de Bohr selon laquelle l'électron suit une trajectoire localisée est à rejeter : pendant la durée d'une révolution, la probabilité de présence de l'électron s'étale dans tout le volume de l'atome.*
- ***Pour une gouttelette d'eau***, $t_0 \simeq 10^{13}$ *s. Cette durée considérable montre qu'à notre échelle, les objets restent des objets matériels localisés.*

Remarque

Inégalité temps-énergie *: il existe une seconde relation d'indétermination d'Heisenberg :*

$$\tau \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

où τ est la durée du signal et ΔE est l'indétermination sur son énergie. Elle n'a pas le même statut que l'inégalité spatiale car τ désigne ici une durée caractéristique d'évolution et non une dispersion statistique autour d'une valeur moyenne (le temps n'est jamais quantifié à la différence de la position, de la quantité de mouvement ou de l'énergie).

On notera qu'avec $E = \hbar\omega$, on obtient $\tau\Delta\omega \geq \frac{1}{2}$, qu'on peut interpréter de façon similaire à ce que nous avions déjà fait pour un paquet d'onde classique où $\Delta\omega$ correspondait alors à la largeur spectrale : plus un signal est court (τ petit), plus il est polychromatique ($\Delta\omega$ est grand).
Cette indétermination sur l'énergie est représentée en vert par la zone floue sur la figure précédente. L'animation permet de voir que cette zone de flou est d'autant moins large que le paquet d'onde est large. On peut en déduire que ***l'énergie d'un état stationnaire ($\tau \to \infty$) est parfaitement définie****.*

Bilan

On peut représenter une particule par un paquet d'onde quasi-monochromatique avec les grandeurs moyennes précisées ci-dessous (comparées à celle d'un paquet d'onde représentant un photon) :

	particule quantique libre (quanton)	**photon**
Énergie		
Impulsion (non relativiste)		
Relation de dispersion		
Vitesse de propagation		

II.5 Spectre en énergie d'une particule quantique libre

Les calculs précédents n'ont pas fait apparaître de condition sur l'énergie [6], de sorte que toutes les énergies telles que $E > 0$ sont accessibles.

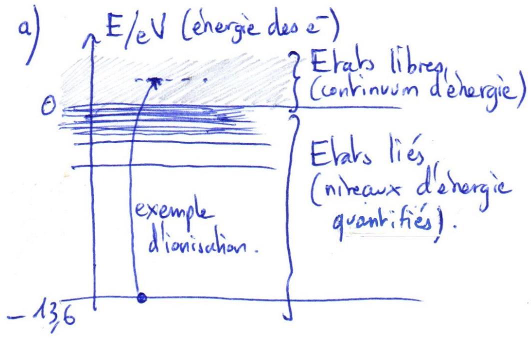
Propriété

Le spectre de particules libres est donc un spectre continu en énergie [a].

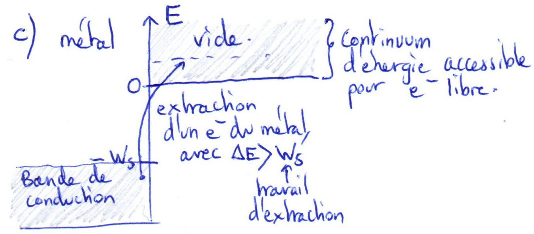
a. On notera que deux impulsions $\pm p\overrightarrow{u}_x$ sont accessibles pour chaque niveau d'énergie ; ceux-ci ont donc un degré de dégénérescence 2.

Cette propriété permet par exemple d'interpréter le **spectre de l'atome d'hydrogène** de la figure ci-contre, pour lequel on fait apparaître des états liés (électron dans un niveau d'énergie de l'atome) ou des états libres [a] (électron libre - l'atome est ionisé en proton H^+). Éclairer un gaz d'hydrogène au repos avec des radiations d'énergie supérieure à $13.6eV$ "arrache" des électrons dans le continuum d'énergie.

a. On notera ici qu'on ne prend pas en compte le spin de l'électron, conformément à ce qui a été précisé en introduction.



Enfin, dans l'**effet photoélectrique**, lorsqu'un photon incident a une énergie supérieure à l'énergie d'extraction W_s au sein du métal, celui-ci arrache un électron au métal et ce dernier se trouve dans un état libre avec l'énergie résiduelle sous forme d'énergie cinétique.



II.6 Vecteur densité de courant de probabilité

Définissons le vecteur densité de courant de probabilité $\overrightarrow{j}$ par analogie avec le vecteur densité de courant $\overrightarrow{j_e} = \rho_e \overrightarrow{v_e}$ rencontré en électromagnétisme :

- l'analogue de la densité volumique de charge ρ_e est ici la densité volumique de probabilité $\rho_p = |\psi|^2$
- l'analogue de la vitesse des charges $\overrightarrow{v_e}$ est ici $\dfrac{\overrightarrow{p}}{m} = \dfrac{\hbar \overrightarrow{k}}{m}$ (on retrouve l'expression de la vitesse de groupe)

Définition

Dans le cas d'une OPPH ou d'un paquet d'onde quasi-monochromatique, le vecteur densité de courant de probabilité est défini par :

$$\overrightarrow{j} = \frac{\hbar \overrightarrow{k}}{m} |\psi|^2$$

Conclusion

Nous avons caractérisé les propriétés d'une particule quantique libre. L'objet du chapitre suivant est d'appliquer ces résultats au cas plus général d'un potentiel stationnaire non nul (marche, puits...).

6. Comme pour le cas de la corde de Melde et les guides d'onde, nous montrerons plus loin que la quantification de l'énergie provient des conditions aux limites.