Chapitre 5 - Mécanique quantique

Leçon I. Idées fondamentales de la mécanique quantique

Dans leçon nous allons décrire les idées fondamentales qui ont permis d'établir la mécanique quantique : le domaine de la Physique portant sur les objets non relativistes possédant une action de l'ordre de grandeur du quantum d'action h, encore appelé constante de Planck.

Nous allons adopter une progression chronologique des différents concepts qui sont à la base de la description quantique.

I.1. Les prémices

I.1.a Thomas Young, le paradoxe

On reprend l'expérience des trous d'Young. Une source de lumière monochromatique et cohérente S est placée derrière une plaque constituée de deux fentes F_1 et F_2. On observe sur un écran E l'intensité lumineuse I dans différentes conditions d'observation.

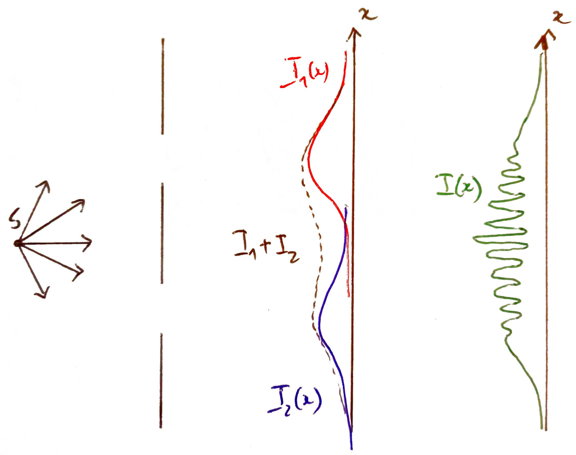

FIGURE 5.1 – Schéma de l'expérience d'interférence lumineuses des fentes d'Young

On a observé que lorsqu'une fente F_1 ou F_2 était fermée, on pouvait voir le profil d'intensité de la lumière passant par une seule fente, soit une tâche de diffraction d'intensité $I_1(x) \propto ||E_1(x)||^2$ ou $I_2(x) \propto ||E_2(x)||^2$, avec $E_1(x)$ et $E_2(x)$ les champs électriques produits par les fentes F_1 et F_2 sur l'écran.

Lorsqu'on ouvrait les deux fentes, on observait une figure d'interférence dont le profil en intensité $I(x)$ est telle que

$$I(x) \propto ||E_1(x) + E_2(x)||^2 \neq ||E_1(x)||^2 + ||E_2(x)||^2.$$

Du fait de **la nature ondulatoire** de la lumière un terme d'interférence dépendant de la différence de phase entre les champs E_1 et E_2 apparaît.

Renouvellons l'expérience, mais cette fois avec une source lumineuse émettant des photons un à un, comme l'on fait Reuben S. Aspden et Miles J. Padgetta de l'SUPA (*School of Physics and Astronomy, University of Glasgow*).

- **Résultat après une durée courte**
Pendant cette durée courte, l'écran ne reçoit qu'un faible nombre de photons. Chaque photon produit sur l'écran un impact localisé.
Si on considère que le photon est une onde, il devrait se scinder en deux "morceaux" au niveau des fentes, puis ces "morceaux" devraient interférer au niveau de l'écran. Il n'en est rien, un seul photon passe par une seule fente et **il n'y a pas de figure d'interférence : l'interprétation purement ondulatoire ne peut s'appliquer**.
Ce premier résultat laisserait penser que le photon est corpusculaire.

- **Résultat après une durée longue**
Pendant cette durée longue, les impacts de photons se sont accumulés et on voit que l'ensemble de ces impacts forme une figure d'interférence.
Si on considère que le photon est un corpuscule, il doit passer par l'une ou l'autre des fentes, or la densité des impacts semble avoir un aspect continu caractéristique de deux ondes ayant interféré, pourtant on sait qu'un seul photon est émis. **Il y a figure d'interférence : l'interprétation purement corpusculaire ne peut s'appliquer**.
Ce dernier résultat laisserait penser que le photon est une onde...nous arrivons à un **paradoxe**.

Les aspects ondulatoire et corpusculaire de la lumière sont inséparables, elle se comporte à la fois comme une onde et un corpuscule on constate qu'il existe une **dualité onde-corpuscule pour la lumière**.

On a un problème : en mécanique, on sait modéliser l'évolution une onde, on sait décrire la trajectoire d'un corpuscule, mais ce nouvel objet onde-corpuscule, comment le représenter ?

I.1.b Louis De Broglie, l'unification

En 1923, Louis de Broglie, un physicien français d'une trentaine d'année qui s'était d'abord orienté vers des études d'histoire, propose, dans sa thèse de doctorat, de généraliser la théorie d'Einstein : **la théorie des quanta de lumière**, théorie avec laquelle Einstein a pu expliquer l'effet photoélectrique en considérant l'aspect corpusculaire et ondulatoire de la lumière.

On associe aux grandeurs caractéristique de l'aspect ondulatoire de la lumière : la pulsation ω et le d'onde $\overrightarrow{k}$ de l'onde électromagnétique, des grandeurs caractéristiques de l'aspect corpusculaire : l'énergie $\mathscr{E}$ et l'impulsion $\overrightarrow{p}$ d'un photon. Cette association est donnée par **les relations de Planck-Einstein**

$$\mathscr{E} = h\nu = \hbar\omega$$
$$\overrightarrow{p} = \hbar\overrightarrow{k}$$

avec $h = 6{,}62 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$ **la constante de Planck** et $\hbar = h/2\pi$, **la constante de Planck réduite**.

De Broglie émet l'idée que toute les particules matérielles ont également un caractère ondulatoire et corpusculaire : il existe la même **dualité onde-corpuscule pour la matière**.

On associe au corpuscule de matière d'énergie $\mathscr{E}$ et d'impulsion $\overrightarrow{p}$, une onde de pulsation ω et de vecteur onde $\overrightarrow{k}$

$$\mathscr{E} = h\nu = \hbar\omega$$
$$\overrightarrow{p} = \hbar\overrightarrow{k}.$$

La longueur λ correspondante de l'onde matérielle est donnée par **la relation de de Broglie**

$$\lambda = \frac{2\pi}{||\overrightarrow{k}||} = \frac{h}{||\overrightarrow{p}||}.$$

Afin de confirmer cette théorie, l'expérience des fentes d'Young a été effectuée avec une source d'électrons uniques, on peut voir, par exemple, cette vidéo réalisée au département recherche de l'entreprise Hitachi. On obtient les mêmes résultats que dans le cas d'une source de photons uniques.

Le problème s'aggrave : c'est maintenant tout l'Univers qui est quantique et qui échappe donc à la description de la mécanique.

I.2. La mécanique quantique

I.2.a Erwin Schrödinger, la description

À partir des travaux de de Broglie, et en considérant l'aspect ondulatoire des particules de matière, Erwin Schrödinger entreprend d'établir une équation décrivant le comportement d'un électron en orbite autour d'un noyau en s'inspirant des équations des cordes vibrantes. Grâce à cette équation, il retrouve les conditions de quantification de Niels Bohr : les électrons gagnent ou perdent de l'énergie de manière quantifiée; lorsqu'ils perdent de l'énergie, ils émettent un rayonnement de fréquence caractéristiques qu'on observe sous la forme de raies spécifiques en spectroscopie.

Schrödinger considère une particule en un point M et à un instant t, de masse m, dans un référentiel $\mathscr{R}$, qui est en interaction avec d'autres systèmes physiques, ce que l'on traduit par une énergie potentielle de la particule notée $V(M,t)$. Il montre que la particule respecte l'équation suivante

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

Cette équation, qui est un postulat de mécanique quantique, est appelée **équation de Schrödinger**.

Dans cette équation apparaît pour la première fois **une grandeur complexe que Schrödinger note ψ et qu'on appellera par la suite fonction d'onde** de la particule. Cette grandeur est l'analogue de la distance à laquelle s'écarte un petit élément de longueur d'une corde vibrante autour de sa position au repos. **Mais, au moment de son introduction, personne ne sait ce que représente cette fonction d'onde.**

☛ Nota bene

La fonction d'onde $\psi(M,t)$ d'une particule matérielle est une grandeur complexe qui porte des informations physiques, alors que la notation complexe d'un champ électrique $E(M,t)$ est employée par commodité calculatoire, seule sa partie réelle a un sens physique.
De plus, il ne faut pas assimiler le champ électrique associé au photon à sa fonction d'onde. La définition précise de la fonction d'onde d'un photon, particule relativiste, ne peut être donnée que dans le cadre de l'électrodynamique quantique qui est une théorie quantique et relativiste...totalement hors de programme.

Schrödinger a ainsi donné le premier outil permettant de décrire ce monde dans lequel les échanges énergétiques ne se font que par saut : c'est le début de la construction de la mécanique quantique. Le problème est qu'on ne sait pas à quoi peu bien correspondre cette nouvelle grandeur qu'est la fonction d'onde.

I.2.b Max Born, l'interprétation

À l'aide cette nouvelle mécanique, Max Born essaye d'interpréter la collision entre une particule chargée, un électron par exemple, et un point chargé, un noyau par exemple. Il arrive à la conclusion suivante : le carré de la norme de la fonction d'onde ψ est proportionnelle à la probabilité de présence de la particule chargée.

♥ Définition

On interprète le carré de la norme de la fonction d'onde d'une particule $||\psi(M,t)||^2$ comme **la densité de probabilité** de présence de la particule dans un volume infinitésimal $\mathrm{d}\tau$ au point M et à l'instant t, soit

$$C||\psi(M,t)||^2 = \frac{\mathrm{d}\mathscr{P}(M,t)}{\mathrm{d}\tau}$$

avec C une constante de normalisation et $\mathrm{d}\mathscr{P}(M,t)$ la probabilité infinitésimale de présence de la particule au point M et à l'instant t telle que

$$\int_{\text{espace}} \mathrm{d}\mathscr{P}(M,t) = 1$$

car on la probabilité de trouver la particule dans tout l'espace à l'instant t est de 1.

La **fonction d'onde** $\psi(M,t)$ est interprété comme **une amplitude de probabilité de présence** de la particule en un point M à l'instant t.

On constate que la fonction d'onde d'une particule doit respecté la relation

$$1 = \int_{\text{espace}} \mathrm{d}\mathscr{P}(M,t) = C\int_{\text{espace}} ||\psi(M,t)||^2 \mathrm{d}\tau$$

donc

$$\frac{1}{C} = \int_{\text{espace}} ||\psi(M,t)||^2 \mathrm{d}\tau$$

c'est-à-dire que l'intégrale sur tout l'espace étudié de la norme au carré de la fonction d'onde doit être fini, on dit aussi que la fonction d'onde $\psi(M,t)$ doit être de **carré sommable**.

Le plus souvent, on normalise les fonctions d'ondes afin d'aboutir à la relation

$$\int_{\text{espace}} ||\psi(M,t)||^2 \mathrm{d}\tau = 1.$$

☛ Nota bene

Le caractère probabiliste de la présence d'une particule nous fait renoncer à la notion de trajectoire, donc de prédictibilité et finalement de causalité. **La perte de la causalité** est ce qui mécontentait le plus Einstein, ainsi que Schrödinger, qui n'était pas d'accord avec l'interprétation que Born avait fait de sa fonction d'onde. D'après Einstein, "Dieu ne joue pas avec des dés" : si le photon passe par une des deux fentes c'est qu'il y a des variables cachées qui échappent à notre interprétation, ce qui ferait de la mécanique quantique "une théorie incomplète". Néanmoins, d'autres expériences ont confirmée le comportement probabiliste des particules quantiques...et donc l'Univers.

I.3. Werner Heisenberg, l'indétermination

I.3.a Démonstration

Dans tout le chapitre, on se limitera à une fonction d'onde unidimensionnelle $\psi(x)$ décrivant une particule sans spin (sans "moment cinétique intrinsèque").

Dans cette partie nous considérons une particule dont l'énergie potentielle $V(x)$ est nul dans tout l'espace (elle est seule dans l'Univers), c'est-à-dire **une particule libre**. D'après l'équation de Schrödinger, il vient que

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

Si on considère l'expression

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

il vient que

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = i\hbar \times (-i\omega)Ae^{i(kx-\omega t)} = \hbar\omega\psi(x,t)$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = -\frac{\hbar^2}{2m}\times(-k^2)Ae^{i(kx-\omega t)} = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\psi(x,t).$$

Ainsi, l'expression précédente est solution de l'équation de Schrödinger si

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

soit, d'après la relation de de Broglie

$$\mathscr{E} = \frac{1}{2}\frac{p^2}{m}.$$

On retrouve une égalité de la mécanique classique : l'énergie mécanique d'un objet est égal à son énergie cinétique $\mathscr{E}_m = \frac{1}{2}\frac{p^2}{m} = \frac{1}{2}\frac{m^2v^2}{m} = \frac{1}{2}mv^2$, lorsqu'il n'y aucun champ (où des champs constants) qui l'influence.

Le problème avec cette solution est qu'elle correspond à une fonction d'onde plane, et comme les ondes planes, elle ne correspond pas à une solution physique réalisable. On le voit car la fonction d'onde n'est pas de carré sommable

$$||\psi(x,t)||^2 = \psi(x,t)\times\psi^*(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}\times A^*e^{-i(kx-\omega t)} = ||A||^2$$

soit

$$\int_{\text{espace}} ||\psi(x,t)||^2 \mathrm{d}\tau = \int_{\text{espace}} ||A||^2 \mathrm{d}\tau \to +\infty.$$

Or, on sait qu'une somme d'ondes planes de vecteur d'onde différent permet de décrire n'importe quel type d'onde, cette combinaison d'ondes est appelée **un paquet d'ondes** et dans le cas d'une somme continue on peut le décrire de telle manière que

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} g(k)e^{i(kx-\omega t)}\mathrm{d}k.$$

L'équation de Schrödinger étant une équation linéaire en $\psi(x,t)$, **le principe de superposition** indique que si une fonction d'onde plane est solution de l'équation, alors toute combinaison linéaire de fonctions d'onde plane l'est également, ainsi **un paquet d'onde, qui est une combinaison linéaire continue, est aussi solution de l'équation de Schrödinger**.

On peut montrer que la description de la fonction d'onde sous la forme d'un paquet d'onde

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} g(k)e^{i(kx-\omega t)}\mathrm{d}k$$

peut être utilisé même dans le cas d'une particule soumise à une certaine énergie potentielle $V(x)$. Les conséquences de l'étude suivante pourront donc se généraliser au cas de particules non

Prenons le cas d'un paquet d'onde simple constitué de trois ondes planes de vecteurs d'onde k_0, $k_0 - \frac{\Delta k}{2}$ et $k_0 + \frac{\Delta k}{2}$, et leur amplitude respective sont proportionnelles à 1, $1/2$ et $1/2$.

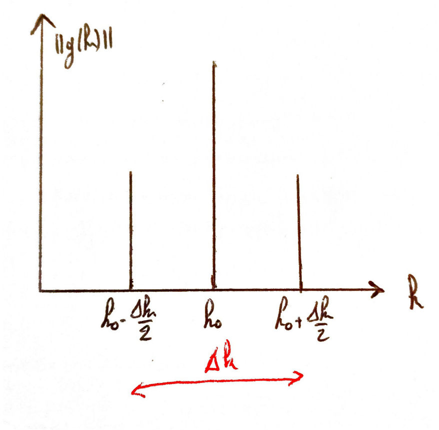

FIGURE 5.2 – Allure de la fonction $||g(k)||$.

On simplifie encore en regardant le paquet d'onde à l'instant $t = 0$, il vient que

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(g(k_0)e^{ik_0x} + g(k_0 - \frac{\Delta k}{2})e^{i\left(k_0 - \frac{\Delta k}{2}\right)x} + g(k_0 + \frac{\Delta k}{2})e^{i\left(k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right)x} \right)$$

$$\psi(x,0) = \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} \left(e^{ik_0x} + \frac{1}{2}\left(e^{i\left(k_0 - \frac{\Delta k}{2}\right)x} + e^{i\left(k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right)x} \right) \right)$$

$$\psi(x,0) = \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0x} \left(1 + \frac{1}{2}\left(e^{-i\frac{\Delta k}{2}x} + e^{i\frac{\Delta k}{2}x} \right) \right)$$

$$\psi(x,0) = \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0x} \left(1 + \cos\left(\frac{\Delta k}{2}x \right) \right).$$

Ainsi la norme au carré de la fonction d'onde est

$$||\psi(x,0)||^2 = \frac{1}{4\pi} ||g(k_0)||^2 \left(1 + \cos\left(\frac{\Delta k}{2}x \right) \right)^2.$$

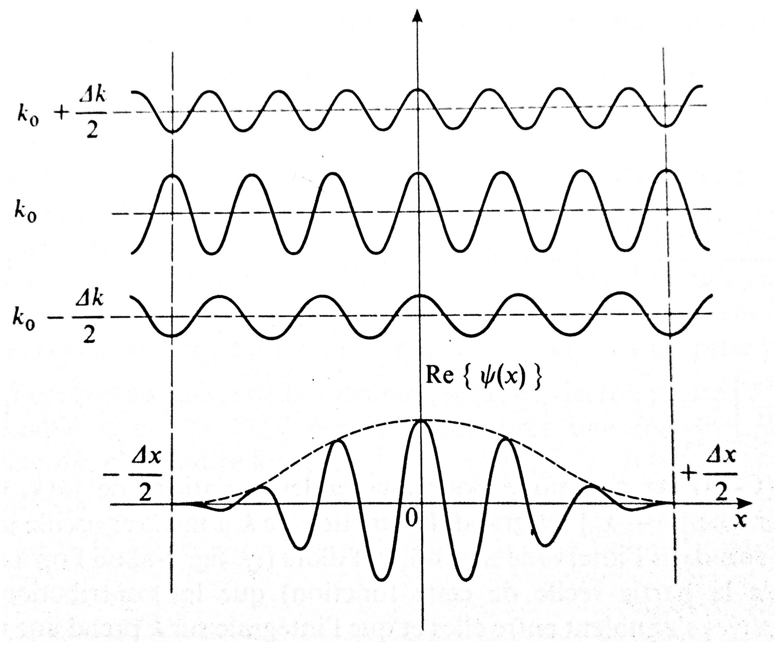

FIGURE 5.3 – Allure de l'amplitude de probabilité de présence de la particule $\psi(x,0)$.

La norme au carré, et donc la densité de probabilité de présence de la particule à l'instant $t = 0$, est maximale lorsque $x = 0$. Pour cette valeur, les trois fonctions d'onde sont en phase et interfèrent constructivement.

Plus on s'écarte de cette position $x = 0$, plus les ondes se déphasent les unes par rapport aux autres et la densité de probabilité décroît.

Les interférences deviennent destructive lorsque

$$\cos\left(\frac{\Delta k}{2}x\right) = -1 \qquad \text{soit} \qquad \frac{\Delta k}{2}x = \pm\pi \qquad \text{soit} \qquad x = \pm\frac{2\pi}{\Delta k}.$$

Ainsi la distance entre deux zones de densité de probabilité nulle de la particule, noté Δx est

$$\Delta x = \frac{4\pi}{\Delta k}$$

soit

$$\Delta x \times \Delta k = 4\pi \qquad \text{soit} \qquad \Delta x \times \frac{\Delta p}{\hbar} = 4\pi \qquad \text{soit} \qquad \Delta x \times \frac{\Delta p}{h}2\pi = 4\pi$$

donc

$$\Delta x \times \Delta p = 2h.$$

I.3.b Indétermination spatiale

La relation que l'on vient de trouver dépend de la forme du paquet d'onde.

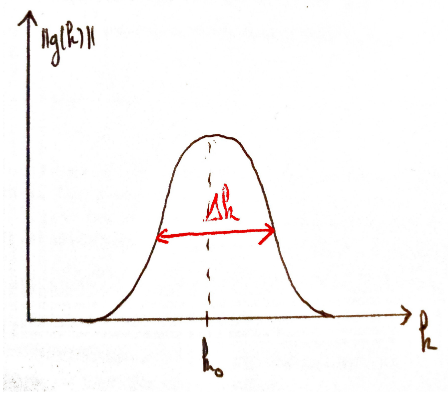

FIGURE 5.4 – Allure de la fonction $||g(k)||$ pour un paquet d'onde quelconque.

Lorsqu'on applique le même raisonnement à tout autre paquet d'onde, on montre que la relation précédente atteint un palier minimum

$$\boxed{\Delta x \times \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

c'est ce qu'on appelle **la relation d'inégalité de Heisenberg spatiale**, ou relation d'indétermination spatiale. Elle implique que la mesure simultanée de la position et de la quantité de mouvement ne peut pas se faire avec une précision supérieure à la limite imposée par l 'inégalité de Heisenberg, quelle que soit la qualité des mesures et des détecteurs utilisés. Elle exprime donc une limitation quantique intrinsèque.

☛ Nota bene

- La relation d'indétermination spatiale est minimale pour un paquet d'onde gaussien, pour tous les autres elle sera supérieure à la valeur minimale de $\frac{\hbar}{2}$.

- On peut entendre parler du principe d'incertitude d'Heisenberg, d'abord, comme cette relation est démontrable c'est un théorème et non un principe ; ensuite, le terme "incertitude" peut laisser croire que la mesure de la position ou de l'impulsion d'une particule est vague ou imprécise ; il n'en est rien, les mesures de la position et de l'impulsion, même réalisées indépendamment, sont précises avec une limitation liée à cette relation fondamentale.

- On retrouve ce type d'inégalité entre deux grandeurs conjuguée par une transformée de Fourier, par exemple entre la fréquence d'un signal et son échantillonage temporel. Le caractère quantique vient de ce lien imposé par la relation de de Broglie entre la longueur d'onde, caractéristique ondulatoire, et l'impulsion, caractère corpusculaire, d'une particule.

- La très petite valeur de h implique qu'à l'échelle macroscopique cette inégalité est forcément respectée.

I.3.c Illustration

Cherchons à savoir dans quelle fente passe le photon ou la particule unique issu de la source S. Pour cela, on mesure l'impulsion fournie à la paroi munie de fentes.

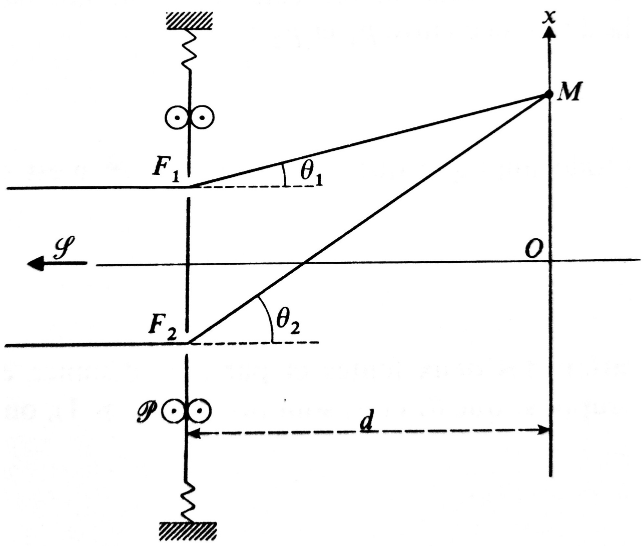

FIGURE 5.5 – Schéma de l'expérience.

La mesure perturbe le système microscopique de manière fondamentale.

Au passage de la fente, la particule est déviée vers un point M de l'écran. La quantité de mouvement transmise par la particule à la paroi est

$$p_1 = -\hbar k \sin\theta_1$$
$$p_2 = -\hbar k \sin\theta_2.$$

Pour savoir dans quelle fente est passé la particule, il faut pouvoir mesurer l'impulsion de l'écran avec une incertitude Δp telle que

$$\Delta p \ll |p_2 - p_1|.$$

Donc, si on utilise la relation d'indétermination spatiale d'Heisenberg, il vient que

$$\Delta x \times \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta x \times |p_2 - p_1| \geq \frac{\hbar}{2}$$

soit

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2|p_2 - p_1|}$$

on a une incertitude sur la position x de la paroi de Δx.

Calculons cette incertitude de position

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\hbar k|\sin\theta_2 - \sin\theta_1|}$$

et si on désigna par a la distance entre les deux fentes et d la distance entre la paroi et l'écran, il vient pour les petits angles que

$$\sin\theta_1 \approx \theta_1 \approx \tan\theta_1 = \frac{x - \frac{a}{2}}{d} \qquad \text{et} \qquad \sin\theta_1 \approx \theta_2 \approx \tan\theta_2 = \frac{x + \frac{a}{2}}{d}$$

donc

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\hbar k|\frac{x+\frac{a}{2}}{d} - \frac{x-\frac{a}{2}}{d}|}$$

donc

$$\Delta x \geq \frac{1}{4\pi}\frac{\lambda d}{a}$$

L'inertitude d'Heisenberg implique que les mesures perturbent de manière fondamentale.

I.4. Particule dans un potentiel indépendant du temps

On considère une particule dont l'énergie potentielle $V(x)$ ne dépend pas du temps. D'après l'équation de Schrödinger il vient que

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

Cherchons des solutions de cette équations.

I.4.a États stationnaires

Pour ce faire, on va chercher des solutions de la forme

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

on dit qu'on effectue une séparation de variable.

En reportant dans l'équation de Schrödinger, il vient que

$$i\hbar\varphi(x)\frac{\mathrm{d}\chi(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\chi(t)\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\varphi(x)\chi(t).$$

En divisant de part et d'autre par $\varphi(x)\chi(t)$, on obtient

$$i\hbar\frac{1}{\chi(t)}\frac{\mathrm{d}\chi(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi(x)}\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x).$$

On a séparé les variables temporelles et spatiales : il y a égalité entre une fonction de t seul, et une fonction de x seul. Cette égalité n'est possible que si chacune des fonctions est en fait une constante.

Une analyse dimensionnelle montre que cette constante doit être homogène à l'énergie potentielle $V(x)$. Prenons comme valeur $\hbar\omega$.

Pour $\chi(t)$ il vient alors que

$$i\hbar\frac{1}{\chi(t)}\frac{\mathrm{d}\chi(t)}{\mathrm{d}t} = \hbar\omega \qquad \text{soit} \qquad \frac{\mathrm{d}\chi(t)}{\mathrm{d}t} = -i\omega\chi(t)$$

on connaît une solution pour cette équation

$$\chi(t) = Ae^{-i\omega t}.$$

On peut incorporer la constante d'intégration A dans la fonction $\varphi(x)$ et la fonction d'onde est alors de la forme

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

et $\varphi(x)$ respecte l'équation suivante

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi(x)}\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x) = \hbar\omega$$

soit

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

En reconnaissant l'énergie totale de la particule $\mathscr{E} = \hbar\omega$, on peut écrire que

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

il s'agit de **l'équation de Schrödinger indépendante du temps**.

Une fonction d'onde de la forme $\psi(x,t) = \varphi(x)e^{-i\omega t}$ est appelée **solution stationnaire de l'équation de Schrödinger** elle conduit à une densité de probabilité indépendante du temps

$$||\psi(x,t)||^2 = ||\varphi(x)e^{-i\omega t}||^2 = ||\varphi(x)||^2.$$

Dans une fonction stationnaire apparaît une seule pulsation ω, donc, d'après les relations de Planck-Einstein, **un état stationnaire correspond à un état d'énergie bien définie** $\mathscr{E} = \hbar\omega$.

☛ Nota bene

- On peut utiliser un opérateur différentiel nommé hamiltonien défini tel que

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x).$$

Il vient que

$$\hat{H}\varphi(x) = \mathscr{E}\varphi(x).$$

On nomme cette équation, **l'équation aux valeurs propres** de l'opérateur hamiltonien : l'application sur **la fonction propre** $\varphi(x)$ redonne cette même fonction multipliée par **la valeur propre** correspondante $\mathscr{E}$.

On peut montrer que cette équation n'admet de solution pour $\varphi(x)$ que pour certaines valeurs de $\mathscr{E}$: **c'est l'origine de la quantification de l'énergie.**

- On prendra garde au sens différent que prend le mot **stationnaire** en mécanique quantique et en mécanique classique, où une onde stationnaire correspond à une forme factorisée sous la forme d'un produit d'une fonction réelle de l'espace et d'une fonction réelle du temps.

I.4.b Indétermination temporelle

À partir des propriétés de la transformée de Fourier, on peut faire le lien entre le temps caractéristique d'évolution d'un système τ et la largeur de sa pulsation $\Delta\omega$ de ce système, soit

$$\tau \times \Delta\omega \geq \frac{1}{2} \qquad \textit{soit} \qquad \tau \times \Delta(\hbar\omega) \geq \frac{\hbar}{2}$$

donc

$$\boxed{\tau \times \Delta\mathscr{E} \geq \frac{\hbar}{2}.}$$

Cette relation traduit **l'indétermination temporelle** d'un système : on ne peut connaître l'énergie d'une particule dans un état instable de τ qu'avec une précision $\Delta\mathscr{E} \geq \frac{\hbar}{2\tau}$.

On constate alors qu'**une particule dans un état stationnaire, soit $\tau \to +\infty$, a une énergie $\mathscr{E}$ parfaitement définie** : $\Delta\mathscr{E} \to 0$.

Synthèse

Connaissances

- Relation de de Broglie.
- Fonction d'onde ψ d'une particule sans spin et densité de probabilité de présence.
- Équation de Schrödinger à une dimension dans un potentiel $V(x)$.
- Fonction d'onde d'une particule libre non localisée.
- Inégalité d'Heisenberg spatiale et paquet d'ondes.
- États stationnaires de l'équation de Schrödinger.

Savoir-faire

- Relier l'énergie de la particule et le vecteur d'onde de l'onde plane associée.
- Interpréter en termes de probabilité l'amplitude d'une onde associée à une particule.
- Utiliser le caractère linéaire de l'équation de Schrödinger (principe de superposition).
- Établir les solutions pour la fonction d'onde d'une particule libre non localisée. Interpréter la difficulté de normalisation de cette fonction d'onde.
- Expliquer, en s'appuyant sur l'inégalité d'Heisenberg spatiale, que la localisation de la particule peut s'obtenir par superposition d'ondes planes.
- Procéder à la séparation des variables temps et espace dans le cas d'une particule soumise à un potentiel indépendant du temps. Distinguer l'onde associée à un état stationnaire en mécanique quantique d'une onde stationnaire au sens usuel de la physique des ondes. Relier l'énergie de la particule à l'évolution temporelle de sa fonction d'onde et faire le lien avec la relation de Planck-Einstein. Identifier le terme associé à l'énergie cinétique.