

Introduction à la mécanique quantique

I Dualité onde-particule

1. Deux descriptions de la lumière
2. Le photon ou la revanche de la vision corpusculaire
3. Relation de Louis de Broglie (1924, Nobel 1929)
4. Manifestations du caractère ondulatoire de la matière
5. Échelle des phénomènes quantiques

II Interprétation des ondes de de Broglie

1. Interférences particule par particule
 - a. Rappel d'optique
 - b. Une expérience d'interférences avec de la lumière
 - c. Une expérience d'interférences avec de la matière
2. Analyse des expériences d'interférences particule par particule
3. Fonction d'onde (M. Born 1926)
4. Lien avec le concept d'orbitale en chimie
5. Principe de superposition
6. Paquets d'ondes libres
7. Relation de dispersion et vitesse de groupe
8. Relation d'incertitude de Heisenberg (1927, Nobel 1932)

III Équation de Schrödinger (1925)

1. Postulat
2. Cas d'une particule libre
3. Courant de probabilité
 - a. Cas d'une OPPH
 - b. Expression générale de \vec{j} (HP)

IV États stationnaires

1. Équation de Schrödinger aux états stationnaires
2. Signification d'un état stationnaire
3. Quelques propriétés mathématiques
4. Évolution d'une superposition d'états stationnaires
5. Oscillations de Rabi

Postulat de Louis de Broglie

À toute particule libre d'énergie E et de quantité de mouvement \vec{p} , on associe une onde plane progressive harmonique de fréquence $\nu = E/h$ et de longueur d'onde $\lambda = h/p$ se propageant dans la direction du mouvement.

Critère partique

Soit S , de dimension ML^2T^{-1} , l'action caractéristique d'un problème physique.

- Si $S \gg \hbar$, la physique classique est suffisante.
- Si $S \simeq \hbar$, le traitement quantique s'impose.

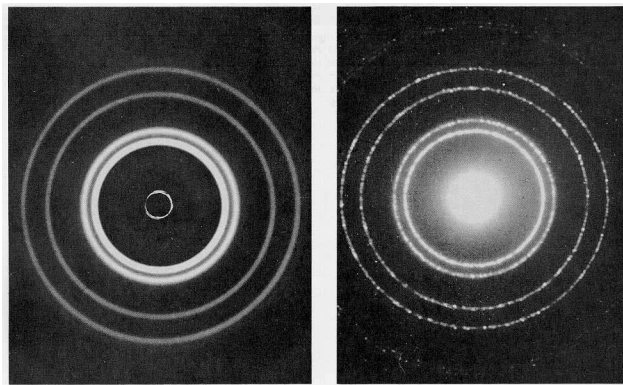


FIGURE 1 – Figures de diffraction produites par une mince couche métallique. À gauche : diffraction d'un faisceau de rayons X. À droite : diffraction d'un faisceau d'électrons. La grande similarité des deux figures prouve le caractère ondulatoire des électrons.

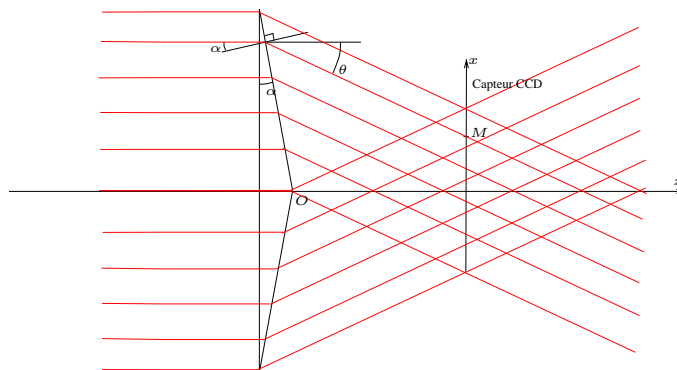


FIGURE 2 – Dispositif d'interférences optiques utilisant un biprisme. Valeurs numériques de l'expérience : $\lambda = 670 \text{ nm}$, $n = 1,5142$, $\alpha = 7,49 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$. Un photon est émis par la source toutes les 100 ms.

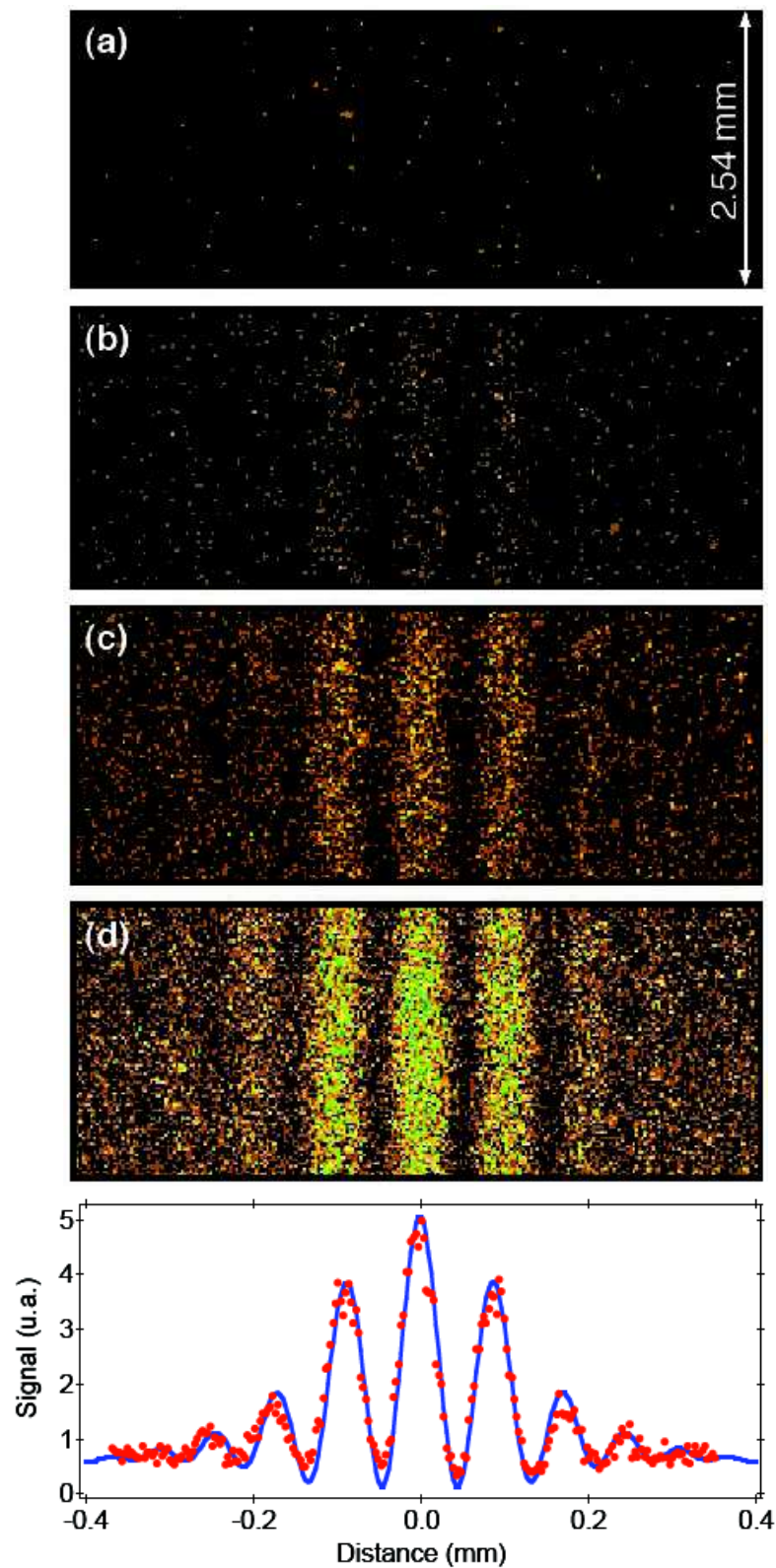


FIGURE 3 – Figures d’interférences obtenues avec un biprisme par accumulation de N prises de vues successives de durée égales à 1s. Les images a, b, c et d correspondant respectivement à $N = 10$, $N = 100$, $N = 500$ et $N = 2000$. D’après V. Jacques, Thèse de doctorat, Source de photons uniques et interférences à un seul photon. De l’expérience des fentes d’Young avec choix retardé. 2007

Analyse des expériences d'interférences particule par particule

- La lumière et la matière présentent des comportements analogues, ce qui confirme l'hypothèse de L. de Broglie.
- Dans les deux cas, les interférences observées montrent que le phénomène présente résolument un caractère ondulatoire. Une théorie ondulatoire est cependant impuissante à expliquer l'activation du détecteur en des points bien localisés.
- Dans les deux cas, l'activation du détecteur en des points bien localisés montre que le phénomène présente un caractère résolument corpusculaire. Une théorie corpusculaire est cependant impuissante à expliquer les franges d'interférences.
- *Les photons comme les électrons présentent donc un double aspect, à la fois ondulatoire et corpusculaire. On parle de dualité onde-corpuscule.*
- Tans que l'électron (ou le photon) n'a pas été détecté, on ignore tout à fait où il se trouve. On ne sait donc pas laquelle des deux voies de l'interféromètre il a emprunté. Si on accède par un moyen quelconque à cette information, on fait disparaître les franges d'interférences. Le concept de trajectoire n'a plus de sens en mécanique ondulatoire.
- Les points d'impact sur les détecteurs apparaissent aléatoirement. Peu à peu, on décèle cependant leur tendance à privilégier certaines zones qui formeront finalement les franges brillantes. *L'intensité lumineuse (ou celle signal électronique) en un point donné est donc révélatrice de la probabilité qu'une particule pénétrant dans l'interféromètre y soit détectée après son parcours.*

Concept de fonction d'onde

En mécanique quantique, on décrit l'état d'une particule par une fonction $\Psi(M, t)$ à valeurs dans \mathbb{C} . À l'instant t , la probabilité de présence de la particule dans un volume infinitésimal $d\tau$ au voisinage du point M est proportionnelle à $|\Psi(M, t)|^2 d\tau$.

Lien avec le concept d'orbitale en chimie

Les propriétés chimiques des corps simples et composés s'expliquent en grande partie par le comportement des électrons présents dans les atomes ou molécules. Pour étudier les particules à cette échelle, la mécanique ondulatoire s'impose. Sauf dans le cas de l'atome d'hydrogène, il s'agit de décrire l'état quantique d'un système de plusieurs électrons alors que le concept de fonction d'onde introduit plus haut concerne une particule unique. Pour traiter par exemple un système de deux électrons, il faudrait en principe introduire une fonction d'onde

$$\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$$

$$M_1, M_2, t \qquad \psi(M_1, M_2, t) \quad .$$

En pratique, on procède en général à l'*approximation orbitale* qui considère que chacun des électrons se trouve dans un état associé à une fonction d'onde monoélectronique. Plutôt que $\psi(M_1, M_2, t)$, on raisonne donc sur deux fonctions $\psi_1(M_1, t)$ et $\psi_2(M_2, t)$. De telles fonctions sont appelées orbitales atomiques ou orbitales moléculaires.

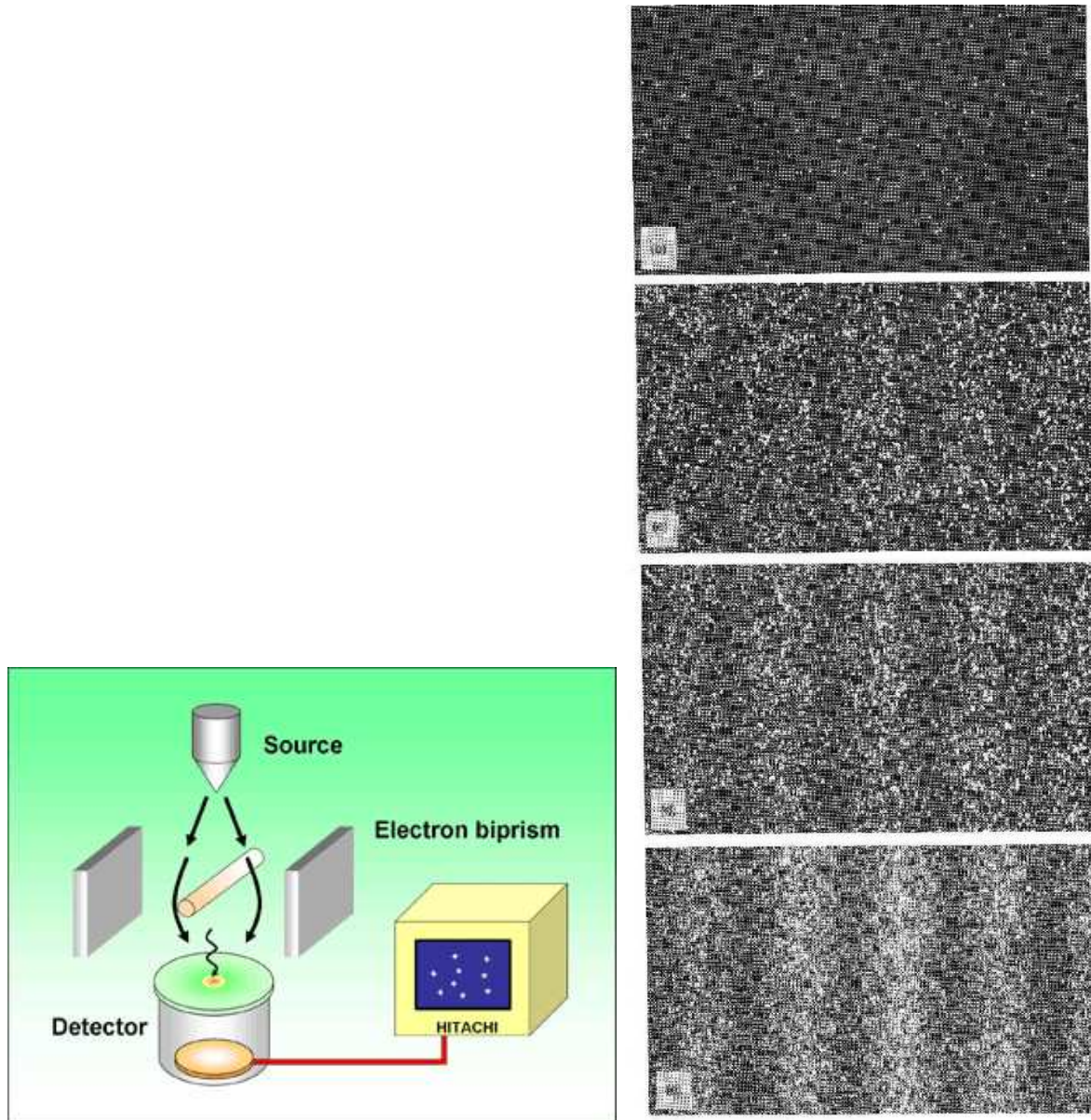


FIGURE 4 – À gauche : dispositif de l'expérience de Tonomura (1989). Le fil porté à un potentiel de +50 kV par rapport aux deux plaques dévie les électrons et agit comme un biprisme électronique, produisant deux ondes planes formant entre elles un angle $2\beta = 8.10^{-6}$ rad.

À droite : figures d'interférences cumulées obtenues dans l'expérience de Tonomura. Les images correspondent à une largeur de 6 mm sur le détecteur et sont obtenues après un grandissement égal à 2000. Le nombre total d'électrons détectés respectivement 100, 3000, 20000 et 70000 de haut en bas.

Principe de superposition

Si un système quantique peut se trouver dans des états décrits par des fonctions d'onde $\psi_1(M, t)$ et $\psi_2(M, t)$, alors il peut aussi se trouver dans l'état $\psi(M, t) = c_1\psi_1(M, t) + c_2\psi_2(M, t)$ avec $c_1 \in \mathbb{C}$ et $c_2 \in \mathbb{C}$.

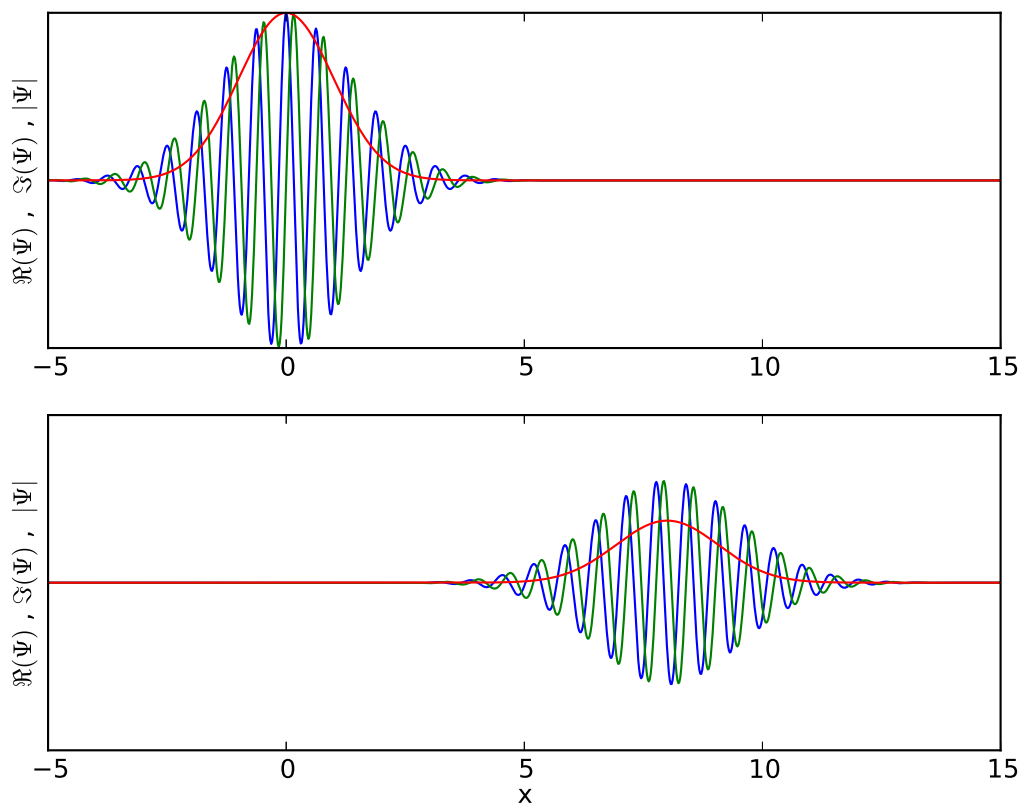


FIGURE 5 – Évolution d'un paquet d'onde typique dans le temps. les courbes oscillantes représentent $\Re(\Psi)$ et $\Im(\Psi)$, celle en cloche en rouge $|\Psi|^2$. L'unité de longueur d_0 est quelconque. L'unité de temps est $\tau = d_0^2 m / \hbar$. Le graphe supérieur représente un paquet d'onde d'impulsion « centrale » $k_0 = 10 d_0^{-1}$ à $t = 0$ et le graphe inférieur le même paquet d'onde à $t = 0,8 \tau$. On constate qu'il s'est déplacé d'une longueur égale à $v_g t$ tout en s'étaillant.

Recherche d'états stationnaires

Pour des particules dans un potentiel U indépendant du temps, la fonction d'onde d'un état stationnaire est de la forme

$$\Psi(M, t) = \Phi(M) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

où Φ et E sont solutions de

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Phi(M) + U(M) \Phi(M) = E \Phi(M) \quad .$$

Il s'agit donc de rechercher les fonctions propres Φ et les valeurs propres E du hamiltonien.

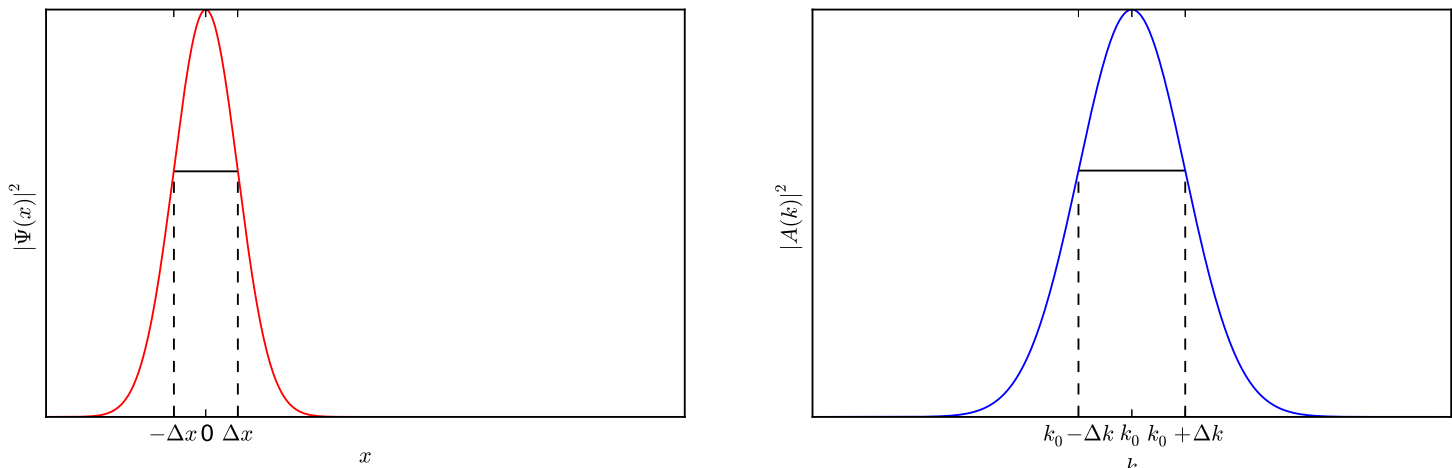


FIGURE 6 – À gauche : représentation de la densité de probabilité $|\Psi(x)|^2$ d'un paquet d'ondes typique. À droite : densité de probabilité en impulsion des ondes planes constituant ce paquet. On caractérise par Δx et Δk la dispersion de ces courbes autour de $x = 0$ et $k = k_0$ respectivement.

Évolution d'une superposition d'états stationnaires

Soient $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n$ des fonctions d'ondes stationnaires d'un hamiltonien H indépendant du temps, d'énergies respectives E_1, E_2, \dots, E_n , associées aux fonctions d'ondes $\psi_1(x, t) = \phi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}$, $\psi_2(x, t) = \phi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}$, ..., $\psi_n(x, t) = \phi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}$.

Soit un système quantique décrit par le même hamiltonien H et dont l'état initial est $\psi(x, t = 0) = c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x) + \dots + c_n\phi_n(x)$.

Alors l'évolution de ψ au cours du temps est donnée par

$$\psi(x, t) = c_1\psi_1(x, t) + c_2\psi_2(x, t) + \dots + c_n\psi_n(x, t)$$

$$\psi(x, t) = c_1\phi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\phi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar} + \dots + c_n\phi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}$$