

Introduction à la mécanique quantique

1.

I. Dualité onde-particule

1. Deux descriptions de la lumière

Historiquement, 2 descriptions de la lumière se sont affrontées à partir du $XVII^{ème}$ siècle.

- Huygens : lumière = onde dont la vitesse dépend du milieu

$$n = \frac{c}{v}$$

↳ sert de base à une démo des lois de Descartes.

- Newton : lumière = particules

un matériau agit mécaniquement (forces) sur ces particules.

↳ on peut aussi en déduire la loi de Descartes.

au $XIX^{ème}$ siècle : la théorie ondulatoire est privilégiée car elle explique les interférences, la diffraction ... (Fresnel ^{Augustin})

Après Maxwell on sait que la lumière = OEP.

↳ l'indice n traduit les interactions de l'onde avec les électrons.

A ce stade la vision particulière est abandonnée.



2. Le photon ou la revanche de la vision corpusculaire

Pour interpréter l'effet photo-électrique, Einstein introduit la notion de photon.

Les photons sont des particules d'énergie $E = h\nu$

avec $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ et d'impulsion $p = \frac{E}{c}$

$$\text{Soit } \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$E = \frac{\hbar}{2\pi} 2\pi \nu$$

$$\text{donc } E = \hbar \omega$$

Planck
Einstein

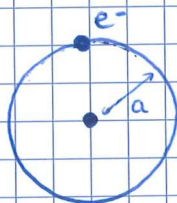
$$p = \frac{\hbar \omega}{c} \quad \text{donc } p = \hbar k \quad \text{De Broglie}$$

La théorie ondulatoire et la théorie particulaire cohabitent : c'est la dualité onde-particule.

3. Relation de Louis de Broglie (1924, Nobel 1929)

* La mécanique est en échec pour étudier le mouvement des particules au sein des atomes.

* Niels Bohr utilise un argument heuristique pour étudier ces mouvements.



atome d'hydrogène

$$L_{\text{oz}} = m a v$$

postulat :

$$L_{\text{oz}} = n \hbar \quad n \in \mathbb{N}$$

On en déduit

$$E_n = \frac{E_0}{n^2} \quad \text{avec } E_0 = \frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = 13,6 \text{ V}$$

cf PCSI

* Par un chemin inverse à celui d'Einstein, de Broglie décide d'associer à toutes particules une onde en reprenant les mêmes relations.

cf. Postulat de Louis de Broglie

$$E = \hbar \nu = \hbar \omega$$

$$p = \frac{\hbar}{\lambda} = \frac{\hbar}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k$$

$$\begin{aligned}\Psi(M, t) &= A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{on} - \omega t)} \\ &= A e^{i\left(\frac{\vec{p}}{\hbar} \cdot \vec{on} - \frac{E}{\hbar} t\right)}\end{aligned}$$

$$p = mv$$

⚠ pour les photons on a $E = pc$

pour les particules on a $E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$

⇒ la relation de dispersion n'est donc pas la même.

• premier intérêt

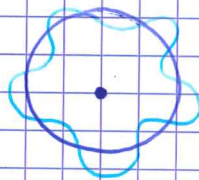
condition
de mode :
propre

$$2\pi a = n\lambda = n \frac{h}{mv}$$

on en déduit :

$$mva = n\hbar$$

c'est le postulat de Bohr



mode propre

4. Manifestations du caractère ondulatoire de la matière

le caractère ondulatoire se manifeste dans des expériences de diffraction ou d'interférence avec des particules (e^- , n , p^+ ...)

cf. Figure 1

5. Echelle des phénomènes quantiques

Si $\lambda \ll$ autres longueurs, l'aspect ondulatoire ne se manifeste plus.

AN: • balle de pétanque

$$m = 1 \text{ kg} \quad v = 1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} \quad \lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6,63 \times 10^{-34}}{1} \text{ m}$$

l'aspect ondulatoire n'intervient pas.

• poussière

$$m = 10^{-15} \text{ kg} \quad v = 10^{-6} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} \quad \lambda = 6,6 \times 10^{-13} \text{ m}$$

même conclusion.

• par contre avec des électrons ...

II - Interprétation des ondes de Broglie (Max Born 1926, Nobel 1954).

3.

Historiquement l'idée de M. Born était audacieuse, choquante, des expériences modernes l'ont confirmée.

1. Interférences particule par particule

a. Rappel d'optique

Pour des ondes cohérentes, $\underline{s} = \underline{s}_1 + \underline{s}_2$

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{2} \underline{s} \underline{s}^* \\ &= \frac{1}{2} \underline{s}_1 \underline{s}_1^* + \frac{1}{2} \underline{s}_2 \underline{s}_2^* + \frac{1}{2} (\underline{s}_1 \underline{s}_2^* + \underline{s}_1^* \underline{s}_2) \\ &\quad \text{interférence} \quad 2\sqrt{I_1 I_2} \cos(\varphi) \end{aligned}$$

b. Une expérience d'interférences avec de la lumière

cf. Figure 2.

$$\theta = (n-1)\alpha \quad x = \frac{\lambda}{2(n-1)\alpha} = 87 \mu\text{m}$$

La source émet les photons un par un avec un espacement de $T = 0,1 \text{ s}$.
Le temps de parcours d'un photon est $\Delta t \approx \frac{3 \text{ m}}{3 \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}} = 10^{-8} \text{ s}$
(si le montage fait 3 m).

Un seul photon est présent à la fois dans le montage (car $\Delta t \ll T$).

cf. Figure 3 (résultat de l'expérience)

On voit les photons arriver un par un de manière aléatoire et constituer peu à peu les franges.

c. Une expérience d'interférences avec de la matière

cf. Figure 4.

Les électrons passent à droite ou à gauche, ils sont déviés par un champ électrique et les 2 faisceaux se croisent avec un angle $2\beta = 8 \times 10^{-6} \text{ rad}$



l'interfrange est donné par $i = \frac{\lambda}{2B}$

à cause de l'aspect ondulatoire de la matière.

des e- accélérés par une tension U ont une vitesse

$$v = \sqrt{\frac{2eU}{m}} \quad \text{ANI: } U = 50 \text{ kV}$$

on trouve $\lambda = 5,5 \text{ pm}$ et $i = 675 \text{ nm}$.

Après grossissement : $i' = 4,35 \text{ mm}$

Les e- sont envoyés un par un avec un espacement $T = 1 \text{ ns}$.

Les e- restent dans le montage pendant $\Delta t = \frac{L}{v} \approx 10^{-8} \text{ s}$

(avec L la longueur du montage).

Il n'y a qu'un seul e- présent à la fois dans le montage car ($\Delta t \ll T$).

cf. Figure 4 (résultats) → confirme la valeur de i .

2. Analyse des expériences d'interférences particule par particule

cf. Analyse des expériences d'interférences particule par particule.

Abandon de l'idée de trajectoire : on ne peut pas savoir de quel côté passe la particule.

"vous avez passé le temps d'être choqué"

Avoir une seule particule à la fois et observer tout de même des interférences c'est très troublant !

3. Fonction d'onde

cf. concept de fonction d'onde.

(remplacer proportionnelle par égale.)

- ψ : fonction d'onde (ou amplitude de probabilité)
- $|\psi|^2 = \rho$: densité de probabilité
- ψ est fondamentalement complexe
- normalisation : $\int_{\text{espace}} |\psi|^2 d\tau = 1$

la condition de normalisation fixe des préfacteurs dans les calculs.

• Cas 1d : $dS = |\Psi(x,t)|^2 dx$

← proba par unité de longueur.

↳ proba de trouver la particule dans $[x, x+dx]$.

• $\Psi' = \Psi e^{i\theta}$ $\theta = \text{cste}$

$|\Psi'|^2 = |\Psi|^2$: Ψ' et Ψ décrivent le même état.

„la mécanique quantique c'est la science de Ψ ”

4. Lien avec le concept d'orbitale en chimie

cf. lien avec le concept d'orbitale en chimie

5. Principe de superposition

cf. principe de superposition

3 postulat explique les expériences d'interférence de II. 1.

Si $\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2$

$|\Psi|^2 = \Psi \Psi^* \rightarrow 4 \text{ termes avec interférence}$

$|\Psi|^2 = \rho = |c_1|^2 \rho_1 + |c_2|^2 \rho_2 + \text{termes d'interférence}$

autre exemple :

$$\Psi(\vec{r}, t) = A_1 e^{i(\vec{k}_1 \cdot \vec{r} - \omega_1 t)} + A_2 e^{i(\vec{k}_2 \cdot \vec{r} - \omega_2 t)}$$

la particule possède la quantité de mouvement $\vec{p}_1 = \hbar \vec{k}_1$ ou

bien $\vec{p}_2 = \hbar \vec{k}_2$ avec des probabilités respectives $|A_1|^2$ et $|A_2|^2$

avec $|A_1|^2 + |A_2|^2 = 1$.

6. Paquets d'ondes libres

$\Psi = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$

Une telle onde (OPPH) n'est pas réaliste.

$|\Psi|^2 = |A|^2$ car sa densité de probabilité occupe tout l'espace et est non normalisable.

Une fonction d'onde réaliste devrait être plus localisée

cf. Figure 5

On l'écrit comme une superposition d'OPPH :

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

$|A(k)|^2 dk$ est la probabilité pour que la pulsation spatiale appartienne à $[k, k+dk]$ et que la q^e de mouvement appartienne à $[\hbar k, \hbar(k+dk)]$.

$|A(k)|^2$ est une densité de probabilité dans l'espace des q^e de mouvement.

cf. Figure 6.

7. Relation de dispersion et vitesse de groupe

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

$$E = \hbar \omega$$

$$p = \hbar k$$

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

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

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v$$

Résultat très satisfaisant, le déplacement probable de la particule est celui du paquet d'onde.

8. Relation d'incertitude de Heisenberg (1927, Nobel 1932)

cf. Figure 6

Δx est l'incertitude sur le résultat d'une mesure de la position.

Δk est l'incertitude sur le résultat d'une mesure de la pulsation spatiale.

$$\text{On a : } \Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$$

Δx est défini comme un écart type $\Delta x = \sqrt{\langle (x)^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ (idem Δk)

On en déduit $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ relation d'incertitude de Heisenberg

Plus on connaît précisément la position moins on connaît S précisément la q^+ de moment et inversement.

On utilise parfois cette inégalité pour borner l'application des concepts de la mécanique classique à la mécanique quantique et les interpréter.

ex: • balle de fusil

$$m = 10 \text{ g}$$

$$\Delta x = 3 \times 10^{-16} \text{ m}$$

$$\Delta v = 1 \times 10^{-16} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$\Delta x \cdot m \Delta v \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta x \Delta v \geq 3 \times 10^{-32} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

} ok

La limitation quantique n'intervient pas.

• atome

$$\Delta x = 10^{-10} \text{ m}, \text{ pour } e^- : \Delta v \geq \frac{\hbar}{2m \Delta x} = 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$\text{donc en CdG } v \geq 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$E_c = \frac{1}{2} m v^2 \approx 10^{-18} \text{ J} \approx 10 \text{ eV}$$

On sait mesurer ce type d'énergie et donc les concepts quantiques sont opérants.

• oscillateur harmonique

$$x = A \cos(\omega t) \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$v = \dot{x} = -\omega A \sin(\omega t)$$

$$E(x) = 0$$

← l'oscillateur oscille entre les x positifs et les x négatifs

$$x^2 = A^2 \cos^2(\omega t)$$

$$E(x^2) = \frac{A^2}{2}$$

$$\Delta x = \frac{A}{\sqrt{2}}$$

$$\text{de même } \Delta v = \frac{\omega A}{\sqrt{2}}$$

$$A : \Delta x \cdot m \Delta v \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \frac{A}{\sqrt{2}} \cdot m \frac{\omega A}{\sqrt{2}} \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Rightarrow m A^2 \omega^2 \geq \hbar \omega \Rightarrow k A^2 \geq \hbar \omega \Rightarrow \frac{1}{2} k A^2 \geq \frac{\hbar \omega}{2}$$

$\frac{1}{2} \hbar \omega$ est l'énergie mécanique E du système oscillant

On en déduit $E \geq \frac{\hbar \omega}{2}$

Un oscillateur harmonique quantique n'est donc jamais totalement au repos.

III - Equation de Schroedinger (1925)

1. Postulat.

Soit une particule de masse m évoluant sous l'effet d'un champ d'énergie potentielle $U(\mathbf{r}, t)$. Sa fonction d'onde $\Psi(\mathbf{r}, t)$ évolue au cours du temps selon.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$$

* $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U$ (Hamiltonien)

$$H\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Rq: en mécanique classique on appelle $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U$ ($= E_m$)
on retrouve l'expression quantique en remplaçant $\vec{p} \rightarrow i\hbar \vec{\nabla}$

* U est l'énergie potentielle bien connue en mécanique classique.

$$E_m \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

On l'appelle parfois "potentiel" $\Delta (\neq V \text{ en Volt})$

* C'est une sorte de PFD quantique !

* Cette équation est linéaire : compatible avec la superposition.

* Cas 1d :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

2. Cas d'une particule libre

6.

En l'absence d'interaction : $U = 0$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

solutions en OPPH

✓ en méca Q : OPPH très C

$$\psi = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{on} - \omega t)}$$

$$\text{est solution si : } \frac{-\hbar^2}{2m} (i\vec{k})^2 \psi = i\hbar (i\omega) \psi$$

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

$$\frac{p^2}{2m} = E \quad \text{comme III.7)$$

3. Courant de probabilité

a. Cas d'une OPPH

$$\psi = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{on} - \omega t)}$$

$$\rho = |\psi|^2 \quad \text{densité de probabilité}$$

Pour une telle onde, le vecteur densité de courant de probabilité est donné par $\vec{j} = \rho \vec{v}$ $\vec{j} = \frac{|\psi|^2 \hbar \vec{k}}{m}$

$$\int_S \vec{j} \cdot d\vec{S} \quad [s^{-1}] \quad \text{probabilité que la particule traverse la surface } S \text{ par unité de temps.}$$

b. Expression générale de $\vec{j}$ (HP)

Dans le cas général, on a :

$$\vec{j} = \frac{-i\hbar}{2m} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

En utilisant l'équation de Schrödinger, on démontre

$$\text{div } \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad \text{ce qui permet l'interprétation de } \vec{j}.$$

Dans le cas d'une OPPH, on cherche l'expression de a .

IV - Etats stationnaires

1. Equation de Schroedinger aux états stationnaires

$$\psi(r, t) = \phi(r) f(t) \quad \leftarrow \text{état stationnaire}$$

Ces états sont importants dans des problèmes stationnaires : $U(r, X)$

ψ est solution de Sch. si :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} f(t) \Delta \phi + U f(t) \phi(r) &= i\hbar f'(t) \phi(r) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \phi}{\phi} + U &= i\hbar \frac{f'(t)}{f(t)} \end{aligned}$$

Les variables sont séparées, il existe une constante E tq :

$$\begin{cases} i\hbar \frac{f'(t)}{f(t)} = E \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \phi}{\phi} + U = E \end{cases} \quad E \in \mathbb{R} \text{ (admis)}$$

$$\Rightarrow f'(t) = -\frac{iE}{\hbar} f(t) \quad \Rightarrow f(t) = A e^{-\frac{iE}{\hbar} t}$$

et ϕ est solution de $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi + U \phi = E \phi$

A est absorbé dans ϕ

$$H \phi = E \phi$$

$$\psi = \phi(r) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

Equation de Schroedinger aux états stationnaires

2. Signification d'un état stationnaire

$$\bullet \rho(r) = |\psi|^2 = |\phi|^2$$

ρ ne dépend pas du temps, l'état est statique.

Sans doute $\vec{j} = \vec{0}$ (HP)

* Plus généralement, les lois de probabilité de toutes les observables (grandeurs mesurables) sont constantes.

* Dans ces états, l'énergie est connue avec certitude c'est E .

* Les états stationnaires sont les « états propres » de l'opérateur Hamiltonien. On cherche ϕ et E ensemble

E valeur propre
 ϕ vecteur propre.

* On se trouve $e^{-i\omega t}$ avec $\omega = \frac{E}{\hbar} \Rightarrow E = \hbar\omega$ Planck-Einstein.

3) * ϕ est continue (admis)

là où U est bornée, ϕ' est continue

si $U(n) = \infty$,

$\phi(n) = 0$

3. Quelques propriétés mathématiques.

Certains problèmes possédant une symétrie, $U(x)$ est paire

Dans ce cas, on peut avant même le début des calculs que

ϕ est soit une fonction paire soit une fonction impaire.

4. Evolution d'une combinaison d'états stationnaires.

cf. poly, évolution d'une superposition d'états stationnaires

Le résultat est une conséquence directe de la linéarité de l'équation de Sch.

5. Reporté sur un exemple du prochain chapitre.

