

Introduction

Ce chapitre présente les généralités sur la description d'un système en mécanique quantique et introduit la **fonction d'onde**. Il est dans la continuité de ce qui a été introduit en première année autour de la **dualité onde-corpuscule** (partie I). Le but est de décrire de manière plus quantitative les phénomènes quantiques complexes en s'appuyant sur la mécanique ondulatoire et notamment sur l'**équation de Schrödinger**. Fondamentalement ces chapitres consacrés à la physique quantique introduisent une modification profonde dans la façon de raisonner et de modéliser une situation physique, basée sur l'*interprétation probabiliste* de la fonction d'onde avec laquelle il va falloir se familiariser, en se bornant à un formalisme simple.

Table des matières

I - Rappels de Sup : Introduction au monde quantique

1) "dualité onde-corpuscule"

Au début du XX^{ème} siècle (avant 1905 donc...), la lumière est une onde (EM) et la matière est constituée d'atomes, donc est de nature corpusculaire. Les travaux de Planck sur le corps noir (1900) puis Einstein sur l'effet photoélectrique (1905) ont conduit à l'introduction de "quanta" (petits paquets) d'énergie transportés par l'onde EM (plus tard appelés *photons*). La relation de **Planck-Einstein** donne l'énergie (notion corpusculaire) du photon en fonction de la fréquence de l'onde EM correspondante :

$$E = h\nu$$

De manière similaire à ce qui a été fait pour le photon, on va associer à chaque particule précédente une onde, appelée *onde de matière*, ce qui signifie que l'on accepte que toute particule se comporte également comme une onde : Louis de Broglie¹ propose cette interprétation en 1923.

On associe ainsi à toute particule de quantité de mouvement $\vec{p}$ une onde de matière de longueur d'onde

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{\|\vec{p}\|}$$

C'est la relation de de Broglie. λ_{dB} est appelé longueur d'onde de Broglie de la particule.

→ Si on note $\vec{k}$ le vecteur d'onde de l'onde associée à la particule, on obtient : $\|\vec{p}\| = \hbar \|\vec{k}\|$

Conséquence : comme la matière peut présenter un caractère ondulatoire, il devrait être possible de réaliser des expériences pour le prouver. Il devrait donc être possible de réaliser une expérience d'interférences ou de diffraction pour mettre ce fait en évidence, ce qui a été réalisé à la fin des années 80.

- On vient de voir que la lumière ET la matière ont toutes deux une double nature ondulatoire et corpusculaire (particule) ; c'est ce qu'on appelle la **dualité onde - corpuscule**.

- *particule* : localisée dans l'espace ; on peut déterminer à chaque instant sa position et sa vitesse (sa trajectoire).
- *onde* : objet qui possède une extension spatiale infinie (présente dans tout l'espace) : onde plane progressive sinusoïdale, par exemple

Ces deux notions sont fondamentalement contradictoires ; en réalité, un objet quantique (photon, électron, proton) n'est ni l'un ni l'autre. Leur nature (ondulatoire ou corpusculaire) apparaît alors différente en fonction du type d'expérience (voir précédemment) réalisée. Les notions de particule ou d'onde ne sont que des *points de vue* différents d'un autre objet, auquel aucun nom n'est donné².

2) Notion de fonction d'onde

- En mécanique classique (newtonienne), toute particule est décrite par sa position et sa vitesse (ou sa quantité de mouvement). De plus, on peut suivre la particule dans l'espace au cours du temps : on connaît sa trajectoire, soit en l'observant, soit en utilisant par exemple le Principe Fondamental de la Dynamique.
- En MQ, on renonce à la notion de trajectoire à cause de la nature ondulatoire de toute particule ; cette trajectoire n'a plus de sens (position d'une onde plane harmonique ?).
- La MQ est basée sur des principes (comme l'est la mécanique classique !). Nous allons en voir ici quelques uns.

1. Physicien et mathématicien français (1892-1987). Prix Nobel en 1929 pour sa découverte de la nature ondulatoire des électrons

2. dans certains vieux ouvrages de MQ écrits par des auteurs français, on voit apparaître le nom de "quanton", pour cet objet quantique, qui n'est ni une particule, ni une onde, mais cette dénomination est officieuse

Principe 1 de la MQ

La description complète de l'état d'une particule de masse m au point M de l'espace à l'instant t se fait au moyen d'une **fonction d'onde** complexe, notée $\underline{\psi}(M, t)$, également appelée *amplitude de probabilité* de trouver la particule au point M à l'instant t .

La probabilité de trouver la particule dans un volume élémentaire $d^3\tau = dx dy dz$ autour du point M à l'instant t est donnée par :

$$dP(M) = |\underline{\psi}(M, t)|^2 d^3\tau$$

La quantité $|\underline{\psi}(M, t)|^2 = p(M, t)$ est appelé *densité de probabilité* (homogène à une probabilité par unité de volume).

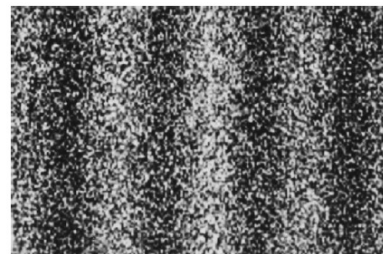
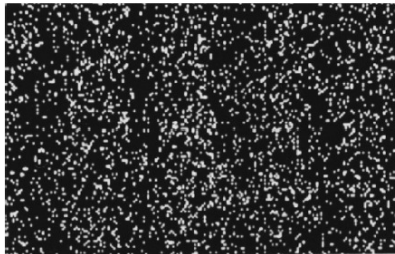
Conséquence : probabilité de trouver la particule dans tout l'espace

$$\int_{\text{espace}} |\underline{\psi}(M, t)|^2 dx dy dz = 1$$

L'évolution de la fonction constitue également un principe un principe de la MQ (comme le PFD en méca...) et sera vu dans la partie II (équation de Schrödinger).

Interprétation d'une expérience de fentes d'Young avec des atomes :

on considère une expérience où des atomes ou des neutrons passent par deux fentes d'Young. Le résultat sur une cellule CCD montre l'apparition de différents spots correspondant aux neutrons incidents, mais également une figure d'interférences.



On considère deux situations préliminaires :

— Situation 1 : seule la fente de gauche est présente, la fente de droite est cachée.

— Situation 2 : seule la fente de droite est présente, la fente de gauche est cachée.

soit

$\underline{\psi}_1(M, t)$: la fonction d'onde d'une particule dans la situation 1

$\underline{\psi}_2(M, t)$: la fonction d'onde d'une particule dans la situation 2

$\underline{\psi}(M, t)$: superposition des 2 situations (donc les fentes sont présentes).

On obtient alors : $\underline{\psi}(M, t) = \underline{\psi}_1(M, t) + \underline{\psi}_2(M, t)$

→ Probabilité de détection de la particule est proportionnelle à $|\underline{\psi}(M, t)|^2$ soit :

$$p(M, t) \propto |\underline{\psi}(M, t)|^2$$

$$p(M, t) \propto |\underline{\psi}_1(M, t) + \underline{\psi}_2(M, t)|^2$$

$$p(M, t) \propto (\underline{\psi}_1(M, t) + \underline{\psi}_2(M, t)) \cdot (\underline{\psi}_1(M, t) + \underline{\psi}_2(M, t))^*$$

$$p(M, t) \propto |\underline{\psi}_1(M, t)|^2 + |\underline{\psi}_2(M, t)|^2 + \underline{\psi}_1(M, t) \cdot \underline{\psi}_2(M, t)^* + \underline{\psi}_2(M, t) \cdot \underline{\psi}_1(M, t)^*$$

$p(M, t) \neq p_1(M, t) + p_2(M, t)$: on ne peut plus dire "la particule est passée par telle ou telle fente" ; en effet, ce n'est pas tout à fait une particule...

3) Inégalité de Heisenberg spatiale**a) Indétermination quantique**Propriété :

La mesure d'une grandeur physique X (position, angle, quantité de mouvement, ...) sur un système quantique donne *a priori* un résultat aléatoire.

On note $\langle X \rangle$ la valeur moyenne des résultats possibles pondérés par leur probabilité d'occurrence (si la valeur X_1 peut être mesurée avec la probabilité p_1 et X_2 avec la probabilité p_2 , alors on obtient $\langle X \rangle = \frac{p_1 X_1 + p_2 X_2}{p_1 + p_2}$).

On définit alors l'écart quadratique moyen (ou écart type) :

$$\Delta X = \sqrt{\langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2}$$

Cet écart type nous renseigne (comme en probabilités...) sur la dispersion des résultats possibles sur la mesure de X .

On l'appelle **Indétermination quantique** de X .

ATTENTION : C'est une propriété quantique à ne pas confondre avec l'incertitude de mesure de X qui est un aspect purement expérimental (en général lié au matériel utilisé, ou au protocole suivi).

b) Exemple : diffraction d'une particule par une fente

Soit une particule de quantité de mouvement $\vec{p} = p\vec{u}_z$ arrivant perpendiculairement sur une fente de largeur a parallèle à Oz .

- L'onde associée à la particule va être *diffractée* par la fente (comme une onde lumineuse).
- Le demi-angle d'ouverture θ du faisceau diffracté est donné par :

$$\sin(\theta) = \frac{\lambda}{a}$$

où λ est la longueur d'onde de de Broglie de la particule.

- Au niveau de la fente, l'abscisse x de la particule se trouve dans l'intervalle $[-\frac{a}{2}; \frac{a}{2}]$, ce qui constitue l'indétermination quantique sur sa position : $\Delta x \approx a$
Cette indétermination vient du fait qu'on ne sait pas exactement par où passe la particule.
- En sortie de fente, à cause de la diffraction, la quantité de mouvement possède elle aussi une indétermination quantique de largeur

$$\Delta p_x = 2p \sin(\theta)$$

soit

$$\Delta p_x = 2p \frac{\lambda}{a}$$

On constate que :

$$\Delta x \Delta p_x = 2p\lambda$$

et si on utilise la relation de de Broglie, on trouve

$$\Delta x \Delta p_x \approx \hbar$$

Ainsi, en localisant la particule avec précision (fente étroite), on introduit une forte dispersion de quantité de mouvement (voir diffraction en optique, et la dualité onde-corpuscule pour le photon...)

c) Inégalité de Heisenberg spatiale

Pour une particule, la position x et la quantité de mouvement p_x selon un même axe (ici (Ox)) sont affectées d'indétermination quantique Δx et Δp_x dont le produit est au moins de l'ordre de grandeur de $\hbar$, constante de Planck réduite :

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \gtrsim \hbar$$

4) Exemple : énergie cinétique minimale

On considère une particule de masse m . On suppose que la particule est confinée suivant l'axe (Ox) dans un intervalle de largeur a . On ne sait pas exactement où elle se trouve dans cet intervalle, mais il est certain qu'elle n'est pas à l'extérieur de cet intervalle. L'inégalité de Heisenberg donne :

$$\Delta p_x \Delta x \approx \hbar$$

c'est-à-dire :

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{a}$$

La particule ne peut donc pas être immobile. On en déduit que la quantité de mouvement suivant (Ox) minimale est :

$$p_{x,min} = \frac{\hbar}{a}$$

D'autre part, l'énergie cinétique est donnée par :

$$E_c = \frac{1}{2} m v_x^2 = \frac{p_x^2}{2m}$$

soit, l'énergie cinétique minimale :

$$E_{c,min} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

Plus le confinement est poussé (a petit), plus l'énergie cinétique minimale est grande.

Exemples

- Soit un ballon de rugby de masse $m = 600$ g confiné sur un terrain de taille $a = 50$ m environ. L'énergie cinétique minimale du ballon due à l'inégalité de Heisenberg est : $E_{c,min} =$
On en déduit la vitesse minimale : $v_{min} =$
Cette vitesse est très largement négligeable devant la vitesse effective du ballon. Le caractère quantique d'un ballon de rugby est donc totalement négligeable devant le caractère classique.
- On considère un électron dans un atome d'hydrogène. Sa masse est $m = 9,11 \cdot 10^{-31}$ kg et il est confiné dans un atome de diamètre $a \approx 1,0 \cdot 10^{-10}$ m. Son énergie cinétique minimale est alors : $E_{c,min} =$
Cette énergie est du même ordre de grandeur que l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène (13,6 eV). La Mécanique Quantique est donc absolument nécessaire dans ce cas !

II - Équation de Schrödinger pour une particule libre**1) Présentation de l'équation de Schrödinger**

Pour déterminer la fonction d'onde d'un système il faut se doter d'une équation d'évolution. On considère dans ce paragraphe un système quantique de masse m et possédant une énergie potentielle $E_p(x, t)$. Son état est décrit par la fonction d'onde $\psi(x, t)$. Si p est l'impulsion du système, son énergie totale s'écrit classiquement :

$$E = \frac{p^2}{2m} + E_p$$

Nous postulons la forme de l'équation d'évolution, due à E. Schrödinger en 1926 (établie selon les principes dit de "quantification canonique").

Définition : Une particule de masse m , possédant une énergie potentielle $E_p(x, t)$ est décrite par une fonction d'onde dont le comportement est régi par l'équation de Schrödinger :

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

Cette équation est linéaire et homogène en ψ . Le principe de superposition est donc applicable. Comme la densité de probabilité est proportionnelle au carré du module de la fonction d'onde, ce principe de superposition va générer des effets d'interférences à l'instar de ce que l'on observe en optique : voir partie I sur les interférences d'ondes de matière.

On remarque que l'équation est du premier ordre en t , ce qui implique que la connaissance de l'état d'un système à un instant t_0 détermine son état à un instant t ultérieur.

2) États stationnaires de l'équation de Schrödinger à une dimension

Dans la suite du chapitre, on se restreindra à l'étude de la particule, donc lorsque $E_p = 0$.

L'équation de Schrödinger permet dans ce cas de séparer la dépendance spatiale et temporelle de la fonction d'onde. On montre que l'on peut mettre la fonction d'onde sous la forme $\psi(x, t) = \phi(x) \cdot \chi(t)$, où les fonctions ϕ et χ sont solution de :

$$i\hbar \frac{d\chi}{dt}(t) = E \cdot \chi(t) \Rightarrow \chi(t) = A \cdot e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2}(x) + E\phi(x) = 0$$

La constante E correspond à l'énergie du système.

Définition :

Une particule libre ($E_p = 0$) de masse m , est décrite par une fonction d'onde :

$$\psi(x, t) = \phi(x) \cdot e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

dont la partie spatiale est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2}(x) = E\phi(x)$$

NB : un état stationnaire quantique est un état d'énergie bien déterminée (une fonction est par exemple une orbitale en chimie, donc d'énergie bien déterminée) ; les valeurs d'énergie sont déterminées par résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire.

La probabilité de présence élémentaire d'une solution stationnaire de l'équation de Schrödinger est indépendante du temps. En effet :

$$dP = C|\psi(x, t)|^2 dx = C|\phi(x) \cdot e^{-\frac{iEt}{\hbar}}|^2 dx = C|\phi(x)|^2 dx$$

Remarque :

D'après ce qui précède, il apparaît dans la fonction d'onde une pulsation bien définie ω :

$$\psi(x, t) = \phi(x) \cdot e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = \phi(x) \cdot e^{-i\omega t}$$

Cette pulsation est reliée à l'énergie par la relation $E = \hbar\omega = h\nu$. On retrouve la relation de Planck-Einstein.

La résolution de

$$\phi''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \phi(x)$$

dans le cas de la particule libre donc donne :

$$\phi(x) = Ae^{ikx}$$

avec $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ le vecteur d'onde de l'onde plane progressive harmonique, ou encore $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$; si on introduit la relation de de Broglie ($p = \hbar k$), on retrouve :

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

L'énergie d'une particule libre correspond à son énergie cinétique ($E_p = 0$!)

ATTENTION !! Nous obtenons ici la fonction d'onde d'un **état stationnaire** de l'équation de Schrödinger, sous forme d'OPPH ; à ne pas confondre avec une *onde stationnaire* au sens usuel de la physique des ondes qui correspond à une solution de la forme $\psi(x, t) = f(x).g(t)$

3) Paquet d'onde associé à la particule libre

Les états décrits par une onde plane ne peuvent pas représenter un véritable système physique car ils ne sont pas normalisables. En effet la probabilité de présence élémentaire vaut dans le cas d'une particule libre :

$$dP = C|\psi(x, t)|^2 dx = C|Ae^{i(kx-\omega t)}|^2 dx = C|A|^2 dx$$

L'intégrale de dP sur tout l'espace diverge ce qui conduit à une probabilité totale infinie, physiquement non acceptable. On retrouve ici le problème de l'onde plane dont l'amplitude constante dans un plan infini conduit à une quantité d'énergie transportée infinie. Comme dans les chapitres précédents, on résout cette difficulté en appliquant le principe de superposition et en considérant des paquets d'ondes que l'on peut écrire :

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

Sous cette forme on voit apparaître la possibilité de s'appuyer sur les résultats de la théorie des transformées de Fourier (voir également chapitre 4 : écriture en variable (t, ω)). En effet on remarque qu'à l'origine des temps :

$$\psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk \text{ soit } g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t=0) e^{-ikx} dx$$

Dans le cas "simple" où $g(k)$ est une amplitude spectrale uniforme (valeur g_0) de largeur Δk : on appelle k_0 la valeur centrale du spectre et Δk son étendue. On suppose en outre la relation de dispersion suivante (faible dispersion) :

$$\omega = \omega(k) = \omega(k_0) + (k - k_0) \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0}$$

que l'on injecte dans l'expression de la fonction d'onde de la particule libre (on note $v_g = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0}$ et $\omega_0 = \omega(k_0)$) :

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{i(kx - (\omega_0 + (k-k_0)v_g)t)} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(-\omega_0 + k_0 v_g)t} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ik(x - v_g t)} dk \\ &= \frac{e^{i(-\omega_0 + k_0 v_g)t}}{\sqrt{2\pi}} \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} g_0 e^{ik(x - v_g t)} dk \\ &= \frac{g_0 e^{i(-\omega_0 + k_0 v_g)t}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{ik_0(x - v_g t)}}{x - v_g t} 2i \sin\left(\frac{\Delta k(x - v_g t)}{2}\right) \\ &= i \frac{g_0 e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}}{\sqrt{2\pi} \Delta k} \frac{\sin(u)}{u} \end{aligned}$$

avec $u = \frac{\Delta k}{2}(x - v_g t)$.

L'évolution de la fonction d'onde est donc scindée en deux : une onde plane *moyenne* qui se propage à la vitesse de phase $v_\varphi = \frac{\omega_0}{k_0}$ et l'*enveloppe* du paquet d'onde qui se propage à la **vitesse de groupe** v_g , qui correspond à la propagation du signal physique.

LIEN AVEC L'INÉGALITÉ DE HEISENBERG

Comme il a déjà été dit (chapitre 4) l'extension spatiale Δx est liée à la largeur spectrale Δk par

$$\Delta x \Delta k \gtrsim 1$$

C'est en fait une propriété très générale des transformées de Fourier qui n'est pas propre à la physique quantique. Cette propriété a cependant une conséquence intéressante du point de vue de la physique quantique que l'on va mettre en évidence en reformulant l'inégalité précédente grâce à la relation de de Broglie : $p = \hbar k$:

$$\Delta x \Delta p \gtrsim \hbar$$

qui correspond à l'inégalité de Heisenberg.

4) (Vecteur densité de) Courant de probabilité

La densité de probabilité (ou probabilité par unité de volume) s'exprime donc selon :

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \psi(x, t) \cdot \psi^*(x, t)$$

De même le vecteur densité de courant de probabilité s'écrit :

$$j_x(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi^*(x, t) \frac{\partial \psi}{\partial x}(x, t) - \psi(x, t) \frac{\partial \psi^*}{\partial x}(x, t) \right]$$

Dans le cas de la particule quantique libre le calcul de ce vecteur densité de probabilité est relativement immédiat :

$$j_x(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} |A|^2 [ik - (-ik)] = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 = \frac{\hbar k}{m} |\psi(x, t)|^2 = \frac{\hbar k}{m} \rho(x, t)$$

ou encore

$$j_x(x, t) = \frac{p_x}{m} \rho(x, t)$$

en utilisant la relation de de Broglie. Le rapport $\frac{p_x}{m}$ est homogène à la vitesse de déplacement du système. Il apparaît sur cette expression que j_x est bien égal au produit de la densité de probabilité multipliée par la vitesse du système :

$$j_x = \rho v_x$$

La quantité ainsi construite correspond bien à un **vecteur densité de courant de probabilité**.