

Introduction à la mécanique quantique

Jordan VIARD

Avril 2012

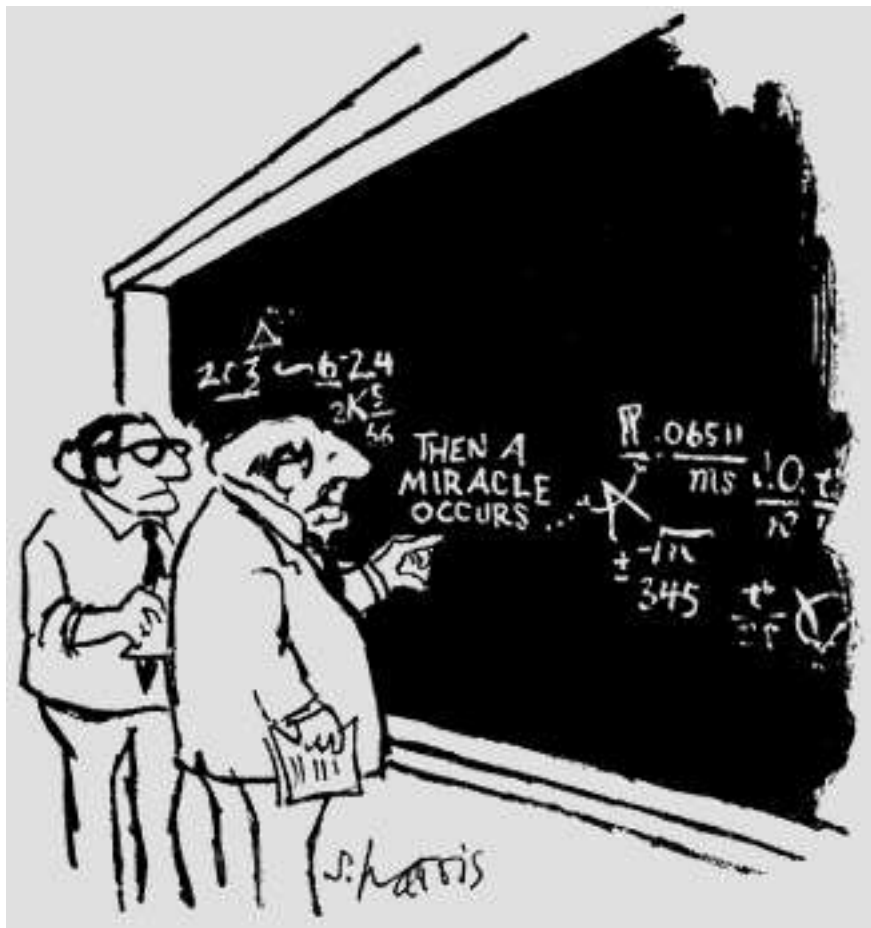


Table des matières

I	Introduction à la théorie des quanta	3
I.1	Où en est la physique classique en 1900 ?	4
I.1.1	L'électron : une particule élémentaire	4
I.1.2	La lumière : une onde électromagnétique	4
I.2	Physique classique : l'échec	4
I.2.1	L'effet photo-électrique	4
I.2.2	Les spectres atomiques	4
I.3	Dualité onde-corpuscule	4
I.3.1	Comme un corpuscule	5
I.3.2	Hypothèse ondulatoire de De Broglie	6
I.3.3	Comme une onde	7
I.4	Quantification de l'énergie dans l'atome	7
I.4.1	L'atome : qui est-il ?	7
I.5	Mesure, processus aléatoires	11
I.6	Critère de quantité	12
II	Concepts de la mécanique quantique	13
II.7	Ondes et fonctions d'onde	14
II.7.1	Quelques rappels ondulatoires	14
II.7.2	Description d'une particule quantique	15
II.8	Equation d'évolution des fonctions d'onde : l'équation de Schrödinger	16
II.8.1	Dérivée partielle par rapport au temps	17
II.8.2	Dérivée partielle par rapport à la position	17
II.9	Paquet d'onde et principe d'incertitude de Heisenberg	18
II.9.1	Paquet d'onde	18
II.9.2	Principe d'incertitude de Heisenberg	19

Introduction

La remise en question des années 1920 a permis, – en sus de l'écroulement de la physique dite "classique", – l'avènement d'un tout nouveau formalisme, bien plus précis et bien plus puissant : la mécanique quantique, qui décrit elle-même les rouages de la physique quantique : celle qui étudie le comportement des objets infiniment petits, à des vitesses proches de celle de la lumière.

Bien plus qu'une lubie de physiciens, ces applications sont aujourd'hui très répandues : du four à micro-ondes au désormais célèbre ordinateur quantique, en passant par le laser et [...]. Une culture générale sommaire du sujet devient donc indispensable.

C'est précisément le but de ce document. Basé sur les cours donnés en L3 à l'Efrei, et face à l'incompréhension que pouvait rencontrer cette matière, ce document a pour but :

- D'expliquer l'avènement de la mécanique quantique ;
- De poser les bases du formalisme qui fait sa force ;
- D'appliquer ce formalisme au travers d'exemples concrets ;
- Et surtout, d'expliquer cette théorie avec tous les détails qu'elle mérite : contrairement à un enseignant en amphithéâtre, qui n'a qu'un nombre limité d'heures, vous pouvez lire à votre rythme !

J'aimerais par ailleurs remercier toutes les personnes qui ont pris la peine de relire ce document, et qui m'ont rapporté les erreurs, coquilles et autres points sombres qui se cachaient ici et là : .

Par ailleurs, n'étant moi-même pas enseignant, il est fort probable que ce document comporte des approximations, voire des erreurs. N'hésitez pas à me les signaler à l'adresse jordan.viard@gmail.com, elles seront corrigées.

Enfin, j'espère que vous prendrez plaisir à lire cet introduction à la mécanique quantique, et que chacun en ressortira plus savant !

Première partie

Introduction à la théorie des quanta

I.1 Où en est la physique classique en 1900 ?

Avant de poser les bases de la mécanique quantique, il est intéressant de se situer le contexte de la physique des années 1900.

I.1.1 L'électron : une particule élémentaire

Vers la fin du 19ème siècle, deux expériences déterminent la place de l'électron en tant que particule élémentaire.

I.1.2 La lumière : une onde électromagnétique

Par ailleurs, les travaux de Maxwell sur l'électromagnétisme ont amené la communauté scientifique à assimiler la lumière à une onde, obéissant à des *équations de propagation*.

I.2 Physique classique : l'échec

Malgré ces avancées en physique classique, elle n'explique pas tout. Certains phénomènes restent jusqu'en 1900 contraires à toute loi.

1. Le rayonnement du corps noir ;
2. L'effet photo-électrique ;
3. Les spectres atomiques.

Étudions à présent de plus près ces trois expériences qui remettent en cause 200 ans de physique.

I.2.1 L'effet photo-électrique

Les physiciens savent déjà que la lumière ultraviolette est capable d'arracher des électrons de la surface d'un métal. Cependant, les mécanismes derrière ce fait sont mal compris, particulièrement le fait que l'énergie cinétique des électrons ainsi émis ne *dépende pas de l'intensité lumineuse* mais de la fréquence utilisée.

I.2.2 Les spectres atomiques

I.3 Dualité onde-corpuscule

Les trois expériences précédentes, et les hypothèses nécessaires pour les expliquer impliquent que la lumière se comporte *tantôt comme une particule, tantôt comme une onde*. Nous allons dans cette sous partie mettre en évidence la façon dont les différents comportements de la lumière se manifestent, au travers d'expériences qui démontrent tantôt l'aspect corpusculaire, tantôt l'aspect ondulatoire.

I.3.1 Comme un corpuscule

Le rayonnement du corps noir

Qu'est ce qu'un corps noir ? Il s'agit d'un objet idéal qui absorbe toute l'énergie électromagnétique qu'il recevrait, sans en *réfléchir* ni en *diffuser*. Le nom vient du fait que la lumière est une onde électromagnétique : si elle est totalement absorbée, l'objet apparaîtra comme de couleur noire.

Le problème est apparu lors de l'étude du rayonnement de ce type de corps, c'est-à-dire du rayonnement émis lorsque l'on chauffe l'objet à plusieurs milliers de Kelvins. En d'autres termes, on cherche à savoir quelles sont les couleurs de la lumière émises par un corps incandescent. La figure 1 montre les résultats attendus couplés aux résultats expérimentaux pour 3 températures testées.

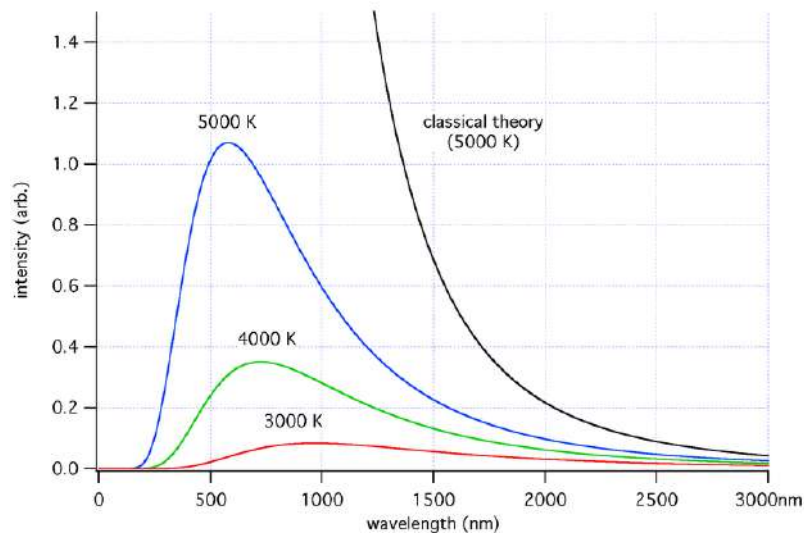


FIGURE 1 – Résultats expérimentaux obtenus lors de l'expérience du rayonnement du corps noir

On constate que la théorie classique (le *modèle de Rayleigh-Jeans*) alors en vigueur est valable pour les basses fréquences, mais lorsque la fréquence augmente, le modèle prédit une augmentation vers l'infini de l'intensité du rayonnement. Un feu de cheminée devient alors une puissante source de rayons gamma ; si c'était effectivement le cas, nous ne serions plus là pour en parler. Ce phénomène porte le nom de "catastrophe ultraviolette".

L'explication est fournie par Max Planck, qui introduit la notion de *quanta* : la lumière serait composée de particules discrètes, ce qui implique que l'absorption et l'émission de cette lumière sont discontinues. Ainsi, l'énergie est quantifiée et ne peut prendre que certaines valeurs :

$$E = nh\nu$$

Où h est une nouvelle constante, la *constante de Planck*, qui vaut $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J.s.}$ Cette quantification permet d'être en accord avec les résultats expérimentaux.

L'effet photo-électrique

Nous avons déjà brièvement présenté l'effet photo-électrique, qui consiste à arracher des électrons à une surface en la bombardant de photons. Contrairement à l'intuition première, augmenter l'intensité du faisceau lumineux n'a aucune incidence sur l'énergie cinétique des électrons émis. Par contre, un changement de fréquence de la lumière utilisée permet de faire varier cette énergie.

L'effet Compton

Un autre effet mettant en évidence la nature corpusculaire de la lumière est l'effet Compton, qui se manifeste lors d'une collision élastique¹ entre un photon et un électron, dont un schéma est visible en figure 2. Cette expérience est intéressante du fait que la *longueur d'onde du photon diffusé est plus longue que celle du photon initial*. On peut calculer cette différence comme suit :

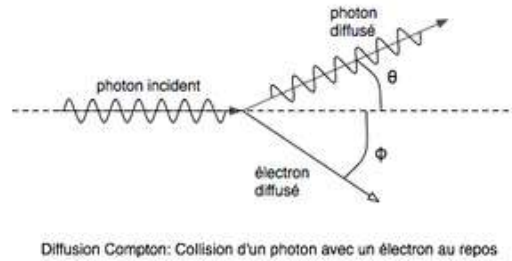


FIGURE 2 – Schéma de l'effet Compton

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda' = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$$

I.3.2 Hypothèse ondulatoire de De Broglie

Jusqu'alors, les concepts d'onde et de particule étaient déjà existants, mais bien distincts. Leurs caractéristiques, *a priori* opposées, sont résumées en table 1.

Ondes	Particules
Continues	Discrètes
Position approximative	Position et impulsion clairement définies à tout instant
Diffraquent et interfèrent	Ne diffractent pas et n'interfèrent pas

TABLE 1 – Propriétés isolées des ondes et des particules

Louis de Broglie a été le premier à établir un lien entre les natures ondulatoires et corpusculaires de la lumière. Pour cela, il a combiné les résultats

1. Une collision élastique est un choc entre deux objets qui produit un rebond *dépendant uniquement de l'élasticité des objets*. Un bon exemple est le billard, qui offre des collisions presque élastiques.

d'Einstein sur la relativité avec ceux de Planck, sur la théorie des quantas. Einstein nous dit que $E = pc$ (où p est l'impulsion égale à la masse fois la vitesse – ce n'est qu'une réécriture de la célèbre $E = mc^2$), tandis que la théorie de Planck stipule que $E = h\nu$ (où ν représente la fréquence). Ainsi, $pc = h\nu$. Sachant que $\lambda = \frac{c}{\nu}$, De Broglie en conclut que :

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (1)$$

Cette hypothèse relie les deux caractères de la lumière, et, couplée à l'expérience, permettent d'affirmer que la lumière se comporte comme une particule lors des interactions avec la matière, et comme une onde lors de la propagation dans la matière, ou dans le vide.

I.3.3 Comme une onde

L'expérience de Davisson et Germer

L'expérience des fentes d'Young

L'expérience des fentes d'Young consiste à imaginer que l'on a un protocole semblable à celui visible en figure ?? ; un canon à particules, un écran, et entre les deux un mur percé de deux fentes de la largeur d'une particule. Si l'on considère l'histogramme des impacts sur l'écran, dans le cas macroscopique (nos particules sont des ballons de football par exemple), le résultat serait la somme des probabilités de chaque fente (voir figure 3).

FIGURE 3 – Histogramme des impacts dans le cas classique

I.4 Quantification de l'énergie dans l'atome

Maintenant que la dualité onde-corpuscule de la lumière a été mise en évidence, il est intéressant de se pencher sur la manière dont l'énergie est quantifiée au sein même de l'atome. Pour cela, une bref historique des modèles atomiques à travers l'histoire s'impose, afin de bien comprendre les implications de chaque changement de modèle, et ainsi les forces et faiblesses de chaque modélisation.

I.4.1 L'atome : qui est-il ?

Il y a eu cinq grands modèles de représentation des atomes. Le tout premier a été introduit par Aristote durant l'Antiquité. C'est d'ailleurs de là que vient le nom "atome" ! Il signifie "indivisible" en grec, car à l'époque, nul ne pensait que les atomes seraient eux-mêmes formés de particules plus petites...

Ce modèle n'était pas pleinement satisfaisant : rapidement, les scientifiques de tout poil se sont rendus compte que des charges électriques étaient en jeu, et qu'il y avait plusieurs types d'atomes bien distincts ! Ces conclusions ont mené au modèle "plum-pudding" de Thomson (alias Lord Kelvin). Ce modèle s'est révélé incorrect à la suite de l'expérience suivante, menée par Rutherford :

En 1907, Rutherford est convaincu que le modèle atomique de Thomson est erroné. Pour s'en convaincre, il met en place le dispositif visible en figure 1. Une source émet un rayonnement de particules α , tout droit sur une fine feuille d'or. Autour de cette feuille d'or et placé un écran, en or lui aussi, entourant la feuille tout en laissant le rayon frapper directement la feuille. Selon le modèle de Thomson, la feuille d'or va se comporter comme une barrière pour les particules α , c'est-à-dire que la majorité des impacts sur l'écran sera située sur la moitié de l'écran entre l'émetteur et la feuille d'or. L'expérience montre *l'exact opposé* : les plus grand nombre d'impacts se situe...directement derrière la feuille d'or !

Rutherford en conclut alors que le modèle atomique de Thomson est faux. Effectivement, si les particules α ont – pour la majeure partie – pu traverser la feuille, c'est que cette même feuille comportait des "trous" laissant passer les particules. Pour la première fois, un modèle faisant distinctement la différence entre le *noyau* et les *couches d'électrons* apparaît. Dans ce modèle, le noyau concentre 99% de la masse de l'atome, et les électrons en sont séparés : ils gravitent autour du noyau.

Rapidement, ce modèle soulève un problème de taille. Ici, l'électron gravitant autour du noyau se comporte comme un dipôle oscillant. Un tel dipôle, selon les lois de l'électromagnétisme énoncées par Maxwell, est voué à perdre de l'énergie. Selon ces postulats, la durée de vie d'un atome n'excéderai pas 10^{-8} secondes ! Or, l'atome est stable...

Niels Bohr, élève émérité de Rutherford, propose alors une "amélioration" de la modélisation de Rutherford permettant de conserver un modèle séparant noyau et électrons. Ce modèle porte le nom de *planétaire*, car il se base sur le modèle planète-satellite (déjà élucidé à l'époque). Ce modèle stipule qu'il existe des orbites "permises", des orbites où la force électrostatique et la force centrifuge s'équilibrent. Calculons le rayon de telles orbites. Nous cherchons les orbites où les forces s'appliquant à l'électron s'équilibrent. On peut ici distinguer deux forces non négligeables : la *force centrifuge* et la *force électromagnétique*. Ainsi, nous cherchons tous les rayons r vérifiant :

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (2)$$

D'où :

$$\begin{aligned} v^2 &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r m} \\ v^2 &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r} \end{aligned} \quad (3)$$

En outre, l'hypothèse de Bohr stipule que :

$$mvr = n \frac{h}{2\pi} \quad (4)$$

On en déduit que :

$$v = \frac{nh}{2\pi mr} \Rightarrow v^2 = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m^2 r^2} \quad (5)$$

C'est en combinant les équations 3 et 5 que l'on va pouvoir tirer l'expression du rayon des orbites permises.

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r} = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m^2 r^2} \Leftrightarrow \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m^2 r^2} \times \frac{4\pi\epsilon_0 m r}{e^2}$$

Dont on déduit que :

$$r_n = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi e^2 m} n^2 \quad (6)$$

À présent que l'on connaît le rayon des orbites permises, on peut calculer l'énergie de chacune de ces orbites. Il suffit de se souvenir que $E = E_c + V$, où E représente les énergies totales des orbites, E_c l'énergie cinétique, et V la force électrostatique. Facile, il n'y a que deux forces en action !

$$E_c = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} \cancel{m} \times \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cancel{m} r} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

On remplace r par son expression fraîchement calculée en 6 :

$$\begin{aligned} E_c &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \times \frac{\cancel{\pi} e^2 m}{\epsilon_0 h^2 n^2} \\ E_c &= \frac{m e^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} = \frac{E_0}{n^2} \end{aligned} \quad (7)$$

De même, la force électrostatique peut se calculer par :

$$V = \int \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} dr \Leftrightarrow V = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{dr}{r^2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

En remplaçant r par l'équation 6 :

$$\begin{aligned} V &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \times \frac{1}{\frac{\epsilon_0 h^2 n^2}{\pi e^2 m}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \times \frac{\pi e^2 m}{\epsilon_0 h^2 n^2} \\ V &= -\frac{e^4 m}{4\epsilon_0 h^2 n^2} = -2E_c \end{aligned}$$

On en conclut (par simple substitution), que :

$$E_n = -\frac{E_0}{n^2}$$

Ainsi, on peut évaluer E_0 à 13,6 eV.

Rappel : un électron-Volt (eV) vaut XXX Joules. C'est une manière de mesurer l'énergie adaptée au monde atomique.

Le modèle planétaire de Bohr apprend une chose fondamentale : *les électrons ne peuvent se trouver qu'à des niveaux d'énergie très précis, et nulle part ailleurs.* La figure 4 montre un diagramme de ces niveaux d'énergie, avec la trajectoire des électrons associée.

Cela ne résout pas directement le problème posé par le modèle de Rutherford. Ainsi, Bohr explique les phénomènes d'absorption et d'émission d'ondes électromagnétiques par des *transitions d'un électron d'un état stable à un autre.* L'énergie portée par l'onde électromagnétique émise vaut alors :

$$h\nu = \Delta E = E_i - E_f$$

Où E_i et E_f sont les énergies des états initial et final. Un schéma de cette situation est visible en figure 5.

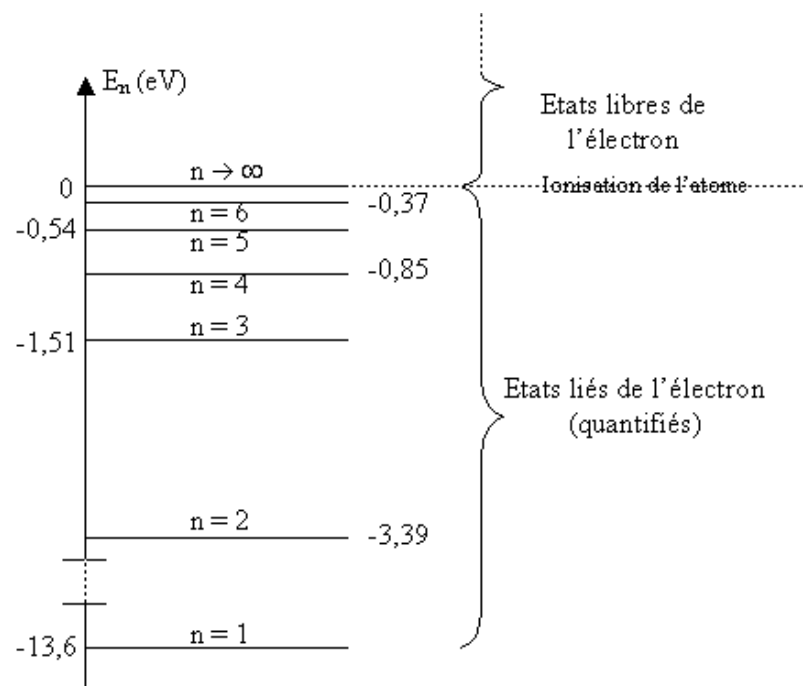


FIGURE 4 – Représentation des niveaux d'énergie dans l'atome

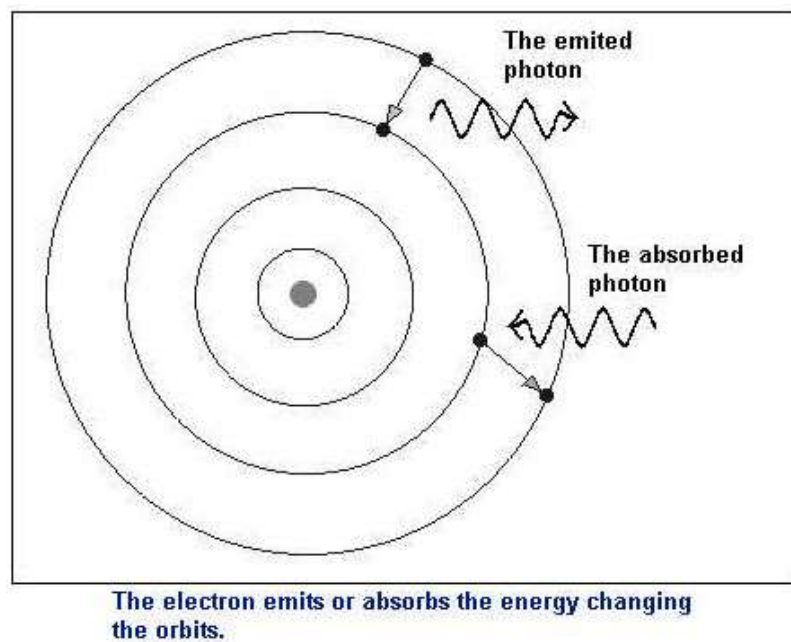


FIGURE 5 – Schéma : Changement d'état au sein de l'atome de Bohr

Ce modèle est plus précis, mais repose sur deux postulats qui sont en contradiction avec les lois classiques, et qui ne sont pas justifiables. Une nouvelle approche de l'atome voit le jour, probabiliste. Au lieu de définir des trajectoires pour l'atome, il s'agit de rechercher les lieux de l'espace autour du noyau dans lequel l'électron a le plus de chances de se trouver. On peut représenter cette densité de probabilité ; quelques exemples sont visibles en figure 6.

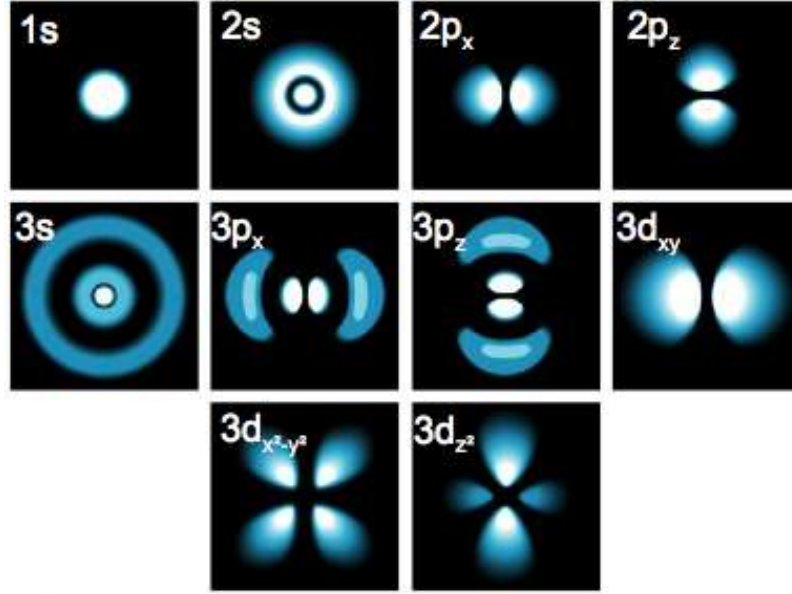


FIGURE 6 – Quelques représentations d'une approche probabiliste

I.5 Mesure, processus aléatoires

L'expérience du "tireur fou" présentée plus haut a mis en exergue un paradoxe fondamental : si l'on fait passer les électrons par une seule fente, puis l'autre, la figure globale sera classique. Au contraire, si l'on ouvre les deux fentes en même temps, de manière à ce que l'on ne puisse pas déterminer par quelle fente l'électron est passé, on observe une figure d'interférence. On peut toutefois se demander : que se passe-t-il si l'on réduit l'intensité du faisceau lumineux jusqu'à ce que les électrons passent *1 par 1* ? Ainsi, on peut assimiler chaque envoi d'électron à un événement indépendant aléatoire. Cependant, on remarque sur la figure 7 qu'il n'en est rien : lorsque le nombre d'électrons est suffisamment grand, la figure d'interférence se forme.

FIGURE 7 – Quelques représentations d'une approche probabiliste

Il est toutefois important de noter que chercher à savoir par quelle fente les électrons sont passés détruit systématiquement la figure d'interférence. Plusieurs

protocoles ont été proposés à cette fin, comme par exemple placer une source lumineuse près de l'une des fentes ; l'électron étant électriquement chargé, il émettra un bref flash lumineux lors de son passage près de la source. Las ! Toutes les ruses employées n'ont abouti qu'à une chose : détruire la figure d'interférence. Ceci permet d'arriver à un concept important en mécanique quantique : *la mesure dérange le système*. Le fait de mesurer, quelque soit le moyen, perturbe l'état du système et peut changer radicalement son comportement. Cette perturbation existe également en sciences macroscopiques : lorsque l'on insère une pipette dans une solution chimique, on apporte des bactéries indésirables qui perturbent le système ; seulement ces perturbations sont trop infimes pour être remarquées.

I.6 Critère de quanticité

Nous avons passé les dernières pages à définir les phénomènes propres au "monde quantique". Nous avons également évoqué le fait que ces comportements se manifestaient à "très petite échelle" ; ce n'est pas très rigoureux !

On considère que les concepts classiques cessent de s'appliquer lorsque "l'action caractéristique" est inférieure à la constante de Planck, h . L'action caractéristique est admise comme le produit de la longueur caractéristique et de l'impulsion caractéristique. Si l'on prend pour exemple la conduction d'électrons dans un fil métallique de largeur a , on obtient un électron d'impulsion p , et une longueur caractéristique de a : il faut donc comparer le produit $p.a$ à h .

Considérant que l'électron est décrit par $\lambda = \frac{h}{p}$, les phénomènes quantiques sont dominants si :

$$\lambda = \frac{h}{p}; a \Leftrightarrow \frac{pa}{h}; 1$$

En d'autres termes, si le rapport $\frac{pa}{h}$ est proche de 1.

Le tableau 2 en montre quelques exemples, avec $h = 6,63.10^{-34} Js$.

Système considéré	Masse (kg)	Vitesse (m/s)	Taille de l'ouverture (m)	$\frac{pa}{h}$
Homme passant une porte	70	1	1	10^{35}
Globule rouge dans un capillaire	10^{-16}	10^{-1}	10^{-4}	10^{12}
Électron dans un fil étroit	9.10^{-31}	10^6	10^{-9}	1,36

TABLE 2 – Exemples de calcul de critères de quanticité

Deuxième partie

Concepts de la mécanique
quantique

Nous avons vu tout dernièrement que la dualité onde-corpuscule se manifestait lorsque les dimensions de l'action approchaient h , la constante de Planck.

II.7 Ondes et fonctions d'onde

II.7.1 Quelques rappels ondulatoires

Nous allons le voir très vite, les ondes forment un excellent moyen de décrire la mécanique quantique. Nous nous intéresserons surtout aux *ondes stationnaires*, et par conséquent périodiques dans l'espace (x) qu'elles traversent. Mathématiquement, cela veut dire que :

$$f(x + n\lambda) = f(x)$$

où λ représente la *longueur d'onde* et n un nombre entier naturel quelconque.

Il est par ailleurs extrêmement simple de décrire une onde plane par une fonction. Cette fonction, que nous nommerons $f(x)$, se décrit comme suit :

$$f(x) = A[\cos kx + i \sin kx] \quad (8)$$

Ici, A représente l'amplitude de l'onde, et k le "nombre d'onde", c'est-à-dire le rapport $k = \frac{2\pi}{\lambda}$.

On peut également pousser le vice et considérer que cette onde est en mouvement dans l'espace, à une vitesse $\vec{v}$.

$$v = \|\vec{v}\| = \frac{\lambda}{T} \quad (9)$$

où λ est toujours la longueur d'onde, et T la période de l'onde ($\frac{1}{\text{fréquence}}$). Par la suite, afin de conserver une cohérence dans les notations, la fréquence sera notée ν (prononcez "nu").

On définit également la pulsation de l'onde : $\omega = 2\pi\nu$. Cette grandeur représente **TODO**.

Nous avons défini plus haut une fonction d'onde plane, mais ce n'est pas suffisant. On peut également imaginer une fonction à deux variables, décrivant l'évolution de l'onde dans l'espace et dans le temps. Aussitôt dit, aussitôt fait !

Considérer que l'onde se déplace revient, *in fine*, à considérer que l'espace (x) se déplace au cours du temps, soit un état du système au temps t' : $x' = x + vt'$. Or nous savons que $v = \frac{\lambda}{T}$. C'est la vieille formule bien connue : $\text{vitesse} = \frac{\text{distance}}{\text{temps}}$.

$$v = \frac{1}{T}\lambda$$

Or, $\omega = 2\pi\nu$, et $\lambda = \frac{2\pi}{k}$. Souvenons-nous également que $\nu = \frac{1}{T}$. Par simple substitution, on aboutit à :

$$v = \frac{\omega}{2\pi} \times \frac{2\pi}{k}$$

La vitesse de propagation de l'onde (que l'on appelle *vitesse de phase*) est donc équivalente à :

$$v = \frac{\omega}{k} \quad (10)$$

En remplaçant :

$$x' = x + \frac{\omega}{k}t'$$

Il suffit à présent d'adapter notre équation d'onde plane $f(x)$ pour prendre en compte la dimension temporelle :

$$f(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} \quad (11)$$

Que l'on ne se méprenne pas : le signe "-" entre les termes " kx " et " ωt " est purement conventionnel. Il résulte du fait que l'on suppose que $t > 0$ et $x > 0$, ce qui reste cohérent en physique.

II.7.2 Description d'une particule quantique

En mécanique quantique, une particule est décrite par une *fonction d'onde*, notée comme suit :

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \exp[i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)] \quad (12)$$

Selon ce formalisme puissant bien que parfois abscon, Ψ contient *toute l'information* sur la particule. On peut à présent manipuler Ψ , afin de remplacer certaines valeurs que nous connaissons bien.

$$k = \frac{\lambda}{2\pi} \Leftarrow TODO$$

où $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ est la constante de Planck réduite. De plus :

$$\omega = 2\pi \nu \text{ et } E = h\nu$$

D'où une autre formulation de Ψ :

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)} \quad (13)$$

On peut à présent se poser la question du sens physique de Ψ . On peut partiellement l'expliquer par l'expérience des fentes d'Young. Cette expérience, très simple, consiste à faire passer deux ondes lumineuses (par exemple des lasers) au travers de 2 fentes, et d'observer un point donné d'un écran, afin de constater le résultat de la diffraction. Un schéma du protocole expérimental est visible en figure 8.

On a, en entrée : $\Psi_{in} = Ae^{i(kx - \omega t)}$.

Et en sortie : $\Psi_{out} = \Psi_A + \Psi_B$.

Ainsi, la probabilité de l'onde (ou particule, au choix!) atteigne un point M donné est :

$$P(M) = |\Psi_{out}(x = m)|^2 = |\Psi_A + \Psi_B|^2$$

Physiquement, Ψ représente une *amplitude de probabilité* tandis que $|\Psi|^2$ représente une *densité de probabilité de présence*. TODO : Différence ?

Que vaut donc $|\Psi|^2$? $|\Psi|^2 = \Psi * \Psi$, où Ψ^* est le complexe conjugué de Ψ . Ainsi :

$$Ae^{-i(kx - \omega t)} \times Ae^{i(kx - \omega t)} = A^2 e^{ix} = A^2$$

Par extension, on peut facilement déduire la probabilité que la particule soit présente dans un petit élément d'espace dV .

$$dP(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV \quad (14)$$

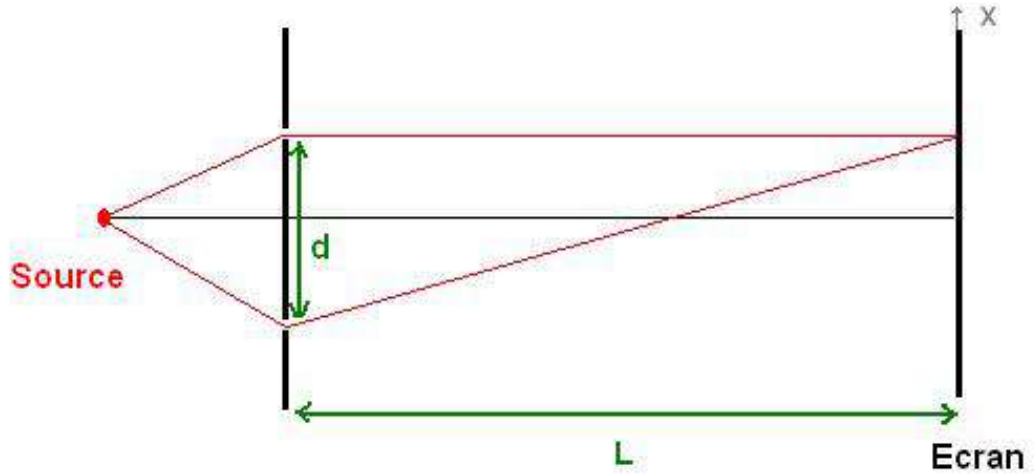


FIGURE 8 – Protocole de l'expérience des fentes d'Young [1]

On peut en déduire une *condition de normalisation*, la probabilité de trouver la particule dans tout l'espace.

$$P = \int_V dP(x) = \int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1 \quad (15)$$

Conclusion d'un logique remarquable.

Si l'on en revient à la probabilité de présence en un point donné et à l'expérience d'Young, on conclut que sur un flux de particules en entrée des fentes, la probabilité de mesure n'est *pas identique pour chaque point*. La distribution des impacts sur l'écran est fonction de la densité de probabilité $|\Psi|^2$, et un histogramme est visible en figure 9.

Sur la figure, il faut bien garder en tête que l'on considère un ensemble de N mesures :

- Ayant pour valeur moyenne $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x)|^2 dx$;
- Présentant une dispersion Δx autour de $\langle x \rangle$, avec $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$.

II.8 Equation d'évolution des fonctions d'onde : l'équation de Schrödinger

La construction de l'équation de Schrödinger est assez simple. Il suffit de se souvenir de l'équation de Schrödinger est une équation différentielle du second ordre, dont les solutions sont des fonctions d'onde $\Psi(x, t)$.

La méthodologie sera la suivante : nous allons tout d'abord dériver par rapport au temps, puis par rapport à la position (x) (on aurait tout à fait pu faire l'inverse) :

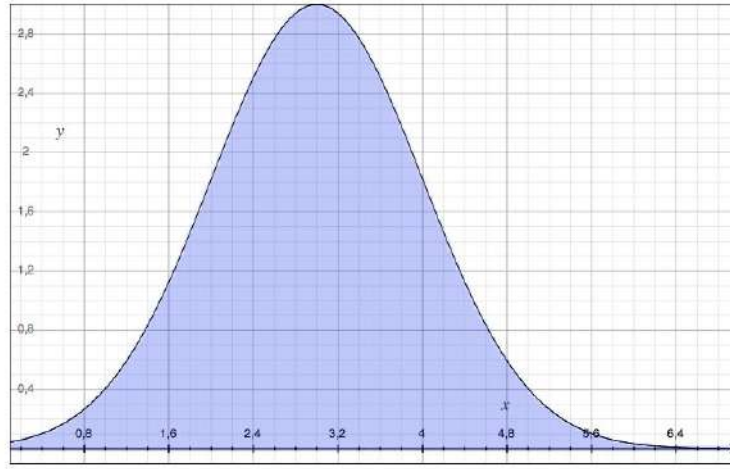


FIGURE 9 – Forme globale de distribution des impacts, suivant une loi normale

II.8.1 Dérivée partielle par rapport au temps

$$\frac{\delta}{\delta t} \Psi(x, t) = \frac{\delta}{\delta t} \left(A e^{i(kx - \omega t)} \right) = -i\omega \underbrace{\left(A e^{i(kx - \omega t)} \right)}_{\psi} = -i\omega \psi$$

Or, nous savons que $E = h\nu = \hbar\omega$ (où E est l'énergie). Nous savons également que cela revient à dire que $E = \hbar\omega$. Si l'on combine la dérivée partielle de notre fonction d'onde avec ces dernières relations, nous obtenons :

$$\frac{\delta}{\delta t} \psi(x, t) = -\frac{i}{\hbar} E \psi \quad (16)$$

Ce résultat permet d'amener la définition de l'*opérateur énergie*. TODO : Développer.

II.8.2 Dérivée partielle par rapport à la position

Dérivons à présent la fonction d'onde $\psi(x, t)$ deux fois par rapport à la position x.

Première dérivation

$$\frac{\delta}{\delta x} \psi(x, t) = ik A e^{i(kx - \omega t)}$$

Seconde dérivation

$$\frac{\delta^2}{\delta x^2} \psi(x, t) = \frac{\delta}{\delta x} \left(ik A e^{i(kx - \omega t)} \right)$$

$$= -k^2 A e^{i(kx - \omega t)} = -k^2 \psi(x, t)$$

Le lecteur attentif se souvient que $k = \frac{\lambda}{2\pi}$, que $\lambda = \frac{h}{p}$, et que $\lambda = \frac{2\pi}{h}$. On en déduit que :

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

Revenons à notre dérivée :

$$\frac{\delta^2}{\delta x^2} \psi(x, t) = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi$$

II.9 Paquet d'onde et principe d'incertitude de Heisenberg

II.9.1 Paquet d'onde

Nous avons tout à l'heure décrit une particule à l'aide d'une onde plane. Pour rappel, l'équation de cette onde était de la forme :

$$A e^{i(kx - \omega t)} = A [\cos kx - \omega t + i \sin kx - \omega t] \quad (17)$$

Or, une telle fonction ne n'appartient pas à l'espace des *fonctions de carrés sommables*. (TODO : Développer). Cela signifie que, si l'on considère la fonction d'onde décrite en figure ?? :

$$\int \Psi^2 dx \neq 1$$

On peut trouver une description plus réaliste d'une particule dans le concept de *paquet d'onde*. Un paquet d'ondes n'est autre qu'une superposition d'ondes planes, que l'on peut exprimer ainsi :

$$\psi(x, t) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (18)$$

Où $\phi(k)$ représente la distribution de l'état k . Les plus perspicaces auront remarqué qu'il s'agit ni plus ni moins que de la définition de la transformée de Fourier appliquée à l'ensemble $\phi(k)$.

Définissons la forme du paquet d'onde à $t = 0$. On définit $\phi(k)$ comme une distribution gaussienne. On peut alors distinguer 3 ondes dans ce paquet :

- k_0 , d'amplitude 1 ;
- $k_0 + \Delta k$, d'amplitude $\frac{1}{2}$;
- $k_0 - \Delta k$, d'amplitude $\frac{1}{2}$.

Donc, à $t = 0$:

$$\psi(x, 0) = \frac{\phi(k)}{\sqrt{2\pi}} \left[e^{i(k_0 x - \omega \times 0)} + \frac{1}{2} e^{i((k_0 + \Delta k)x - \omega \times 0)} + \frac{1}{2} e^{i((k_0 - \Delta k)x - \omega \times 0)} \right]$$

Ce qui, après simplification, nous donne :

$$\frac{\phi(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0 x} \left[1 + \frac{1}{2} e^{i\Delta k x} + \frac{1}{2} e^{-i\Delta k x} \right]$$

$$\frac{\phi(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} [1 + \cos \Delta kx] \quad (19)$$

Or, lorsque ψ est maximal, $x = 0$ (les 3 ondes sont en phase). De plus, lorsque les 3 ondes sont déphasées de π , $\psi = 0$. Enfin, on peut également déduire que $\psi(x)$ s'annule aux points $x_0 = \Delta x$ tels que $\Delta kx_0 = \Delta k\Delta x = \pi$.

Ces dernières équations définissent la forme du paquet d'onde.

II.9.2 Principe d'incertitude de Heisenberg

Bibliographie

- [1] Damien Szyszka et Yann Moisan. Dualité onde-corpuscule, Juin 2005.
[http ://www.etudes.ecp.fr/physique/illustrations/dualite.htm](http://www.etudes.ecp.fr/physique/illustrations/dualite.htm).