

MécaQ chap.1 – Equation de Schrödinger – Particule libre

1. Fonction d'onde – Principe de superposition

- 1.1. La fonction d'onde : une amplitude de probabilité
- 1.2. Principe de superposition – Interférences avec des particules
- 1.3. Analogies et différences avec l'optique ondulatoire
- 1.4. Relation de Planck-Einstein – Relation de de Broglie

2. Equation de Schrödinger pour une particule libre – Etats stationnaires

- 2.1. Equation de Schrödinger
- 2.2. Etats stationnaires
- 2.3. Partie spatiale des états stationnaires – Equation de Schrödinger indépendante du temps
- 2.4. Relation de dispersion des états stationnaires – Interprétation physique

3. Paquet d'onde – Relation d'incertitude d'Heisenberg

- 3.1. La vitesse de groupe s'identifie à la vitesse de la particule
- 3.2. Largeurs spectrale et spatiale du paquet d'onde : relation d'incertitude d'Heisenberg
- 3.3. Courant de probabilité pour une particule libre

Intro : Les chapitres qui suivent sont une introduction à la physique quantique, limitée à ce que l'on appelle la *mécanique ondulatoire*. On ne donnera donc pas tous les postulats de cette théorie.

Les particules seront décrites par la mécanique quantique, pas par les principes de Newton ou par les équations de Maxwell. On verra cependant que, par construction, certaines relations de la physique classique peuvent être transposées en mécanique quantique.

Après avoir rappelé ce qu'est la fonction d'onde, on donne l'équation de Schrödinger pour une particule libre (pas d'interactions avec l'extérieur). On étudie une famille de solution, les états stationnaires, que l'on identifiera aux ondes de de Broglie.

Ces solutions, non physiquement acceptables, peuvent être regroupées en paquet d'onde pour décrire correctement une particule. Cette opération permet d'associer les relations d'incertitude d'Heisenberg à une propriété générale des transformées de Fourier.

1. Fonction d'onde – Principe de superposition

1.1. La fonction d'onde : une amplitude de probabilité

Fonction d'onde d'une particule (situation générale 3D)

L'état mécanique d'une particule quantique est **complètement décrit** par un champ nommé **fonction d'onde** $\Psi(\vec{r}, t)$ de la particule. Elle s'interprète comme une **amplitude de probabilité**.

Son module au carré $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ est une **densité volumique de probabilité**. La quantité :
 $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau$
est la **probabilité** de trouver à l'instant t la particule dans un volume $d\tau$ centré sur la position \vec{r} .

Naturellement, la fonction d'onde doit vérifier la **condition de normalisation** suivante :

$$\iiint_{\text{partout}} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau = 1$$

En physique quantique, l'utilisation d'un champ complexe est fondamentale, ce n'est pas un commode intermédiaire de calcul.

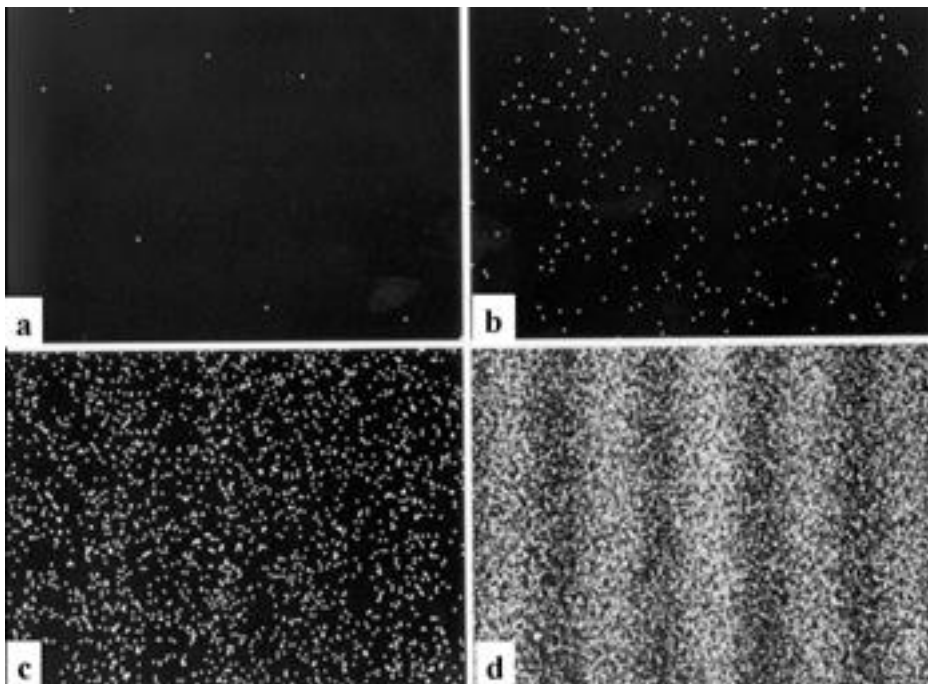
Noter que pour décrire une particule (un point matériel), la fonction d'onde de la physique quantique remplace le couple {vecteur position ; vecteur vitesse} de la physique classique. « L'état mécanique » à un instant t n'est plus simplement donné par deux vecteurs (6 valeurs), mais par un champ (une infinité de valeurs). La physique quantique est construite comme une théorie des champs.

La particule se trouve « un peu partout en même temps » lorsqu'elle se **propage** : c'est l'aspect **ondulatoire**. Lorsqu'elle est **détectée**, elle l'est en une position bien précise de l'espace : c'est l'aspect **corpusculaire**.

- ❖ Donner l'unité de la fonction d'onde dans le cas 3D
- ❖ Dans le cas 1D, préciser l'interprétation de la fonction d'onde, son unité, la condition de normalisation

1.2. Principe de superposition – Interférences avec des particules

Comme vu en PCSI, la dualité onde-corpuscule s'observe de manière évidente dans une expérience type fentes d'Young, avec des photons ou des électrons (ou des atomes). Les impacts localisés, successifs, et aléatoirement distribués sont conformes à l'idée qu'on se fait d'un corpuscule. L'apparition des franges d'interférences lorsque le nombre d'impacts est grand est conforme à l'idée qu'on se fait d'une onde.



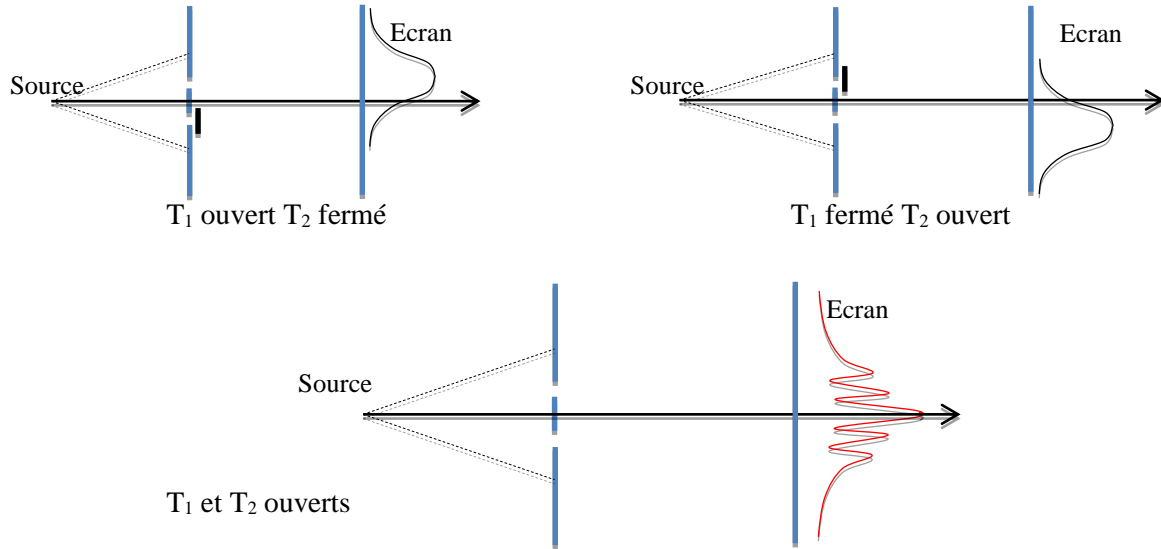
<http://rdg.ext.hitachi.co.jp/rd/movie/doubleslite.wmv>

<http://www.youtube.com/watch?v=ZJ-0PBRuthc>

[Experience avec des molecules de phtalocyanine.](#)

http://www.youtube.com/watch?feature=player_detailpage&v=vCiOMQIRU7I

Voici un résumé de ce que l'on observe en obstruant une des deux fentes, puis aucune.



Le phénomène d'interférences quantiques montre clairement que la densité de probabilité de présence sur l'écran ne vérifie pas le principe de superposition. C'est bien la raison pour laquelle la fonction d'onde représente une amplitude de probabilité, et pas une densité de probabilité.

Par analogie avec l'optique ondulatoire, c'est donc **la fonction d'onde qui vérifie le principe de superposition** : la fonction d'onde totale en un point de l'espace est la somme des fonctions d'onde qui s'y trouvent.

1.3. Analogies et différences avec l'optique ondulatoire

On voit apparaître de manière évidente une analogie avec l'optique ondulatoire :

- la fonction d'onde est l'analogue du champ électrique : vérifient la superposition
- la densité de probabilité de présence est l'analogue de l'éclairement : ce qui est observé sur l'écran

Fort de cette analogie, il est très facile de comprendre le calcul suivant, qui est l'analogue quantique de la formule de Fresnel des interférences à deux ondes. On considère par exemple un faisceau d'électrons envoyé sur un dispositif de fentes d'Young.

On note :

- Ψ_1 la fonction d'onde associée à un électron avec le trou supérieur ouvert seul ;
- Ψ_2 la fonction d'onde associée à un électron avec le trou inférieur ouvert seul ;
- Ψ la fonction d'onde associée à un électron avec les deux trous ouverts.

Ces fonctions d'onde sont considérées sur l'écran et sont donc associées à des densités surfaciques de probabilité.

Si seul le trou supérieur est ouvert, alors la probabilité qu'un électron parvienne sur un élément de surface dS infinitésimal placé en M sur l'écran à l'instant t est :

$$dp_1(M, t) = |\underline{\Psi}_1(M, t)|^2 dS$$

Si seul le trou inférieur est ouvert, alors la probabilité qu'un électron parvienne sur un élément de surface dS infinitésimal placé en M sur l'écran à l'instant t est :

$$dp_2(M, t) = |\underline{\Psi}_2(M, t)|^2 dS$$

À présent, on ouvre les deux trous et la probabilité devient :

$$dp(M, t) = |\underline{\Psi}(M, t)|^2 dS$$

Par analogie avec la superposition des amplitudes d'ondes cohérentes en optique, on peut donc proposer la fonction d'onde totale :

$$\underline{\Psi}(M, t) = \underline{\Psi}_1(M, t) + \underline{\Psi}_2(M, t)$$

Alors, la probabilité de détection sur l'écran devient

$$dp = |\underline{\Psi}_1(M, t) + \underline{\Psi}_2(M, t)|^2 dS$$

$$dp = |\underline{\Psi}_1(M, t)|^2 dS + |\underline{\Psi}_2(M, t)|^2 dS + 2 \operatorname{Re}\left\{ \underline{\Psi}_1(M, t) \underline{\Psi}_2^*(M, t) \right\} dS$$

En faisant apparaître les phases à l'origine des fonctions d'onde :

$$\underline{\Psi}_1(M, t) = |\underline{\Psi}_1(M, t)| e^{j\varphi_1}$$

$$\underline{\Psi}_2(M, t) = |\underline{\Psi}_2(M, t)| e^{j\varphi_2}$$

puis le déphasage :

$$\Delta\varphi = \varphi_2 - \varphi_1$$

on obtient :

$$dp = |\underline{\Psi}_1(M, t)|^2 \cdot dS + |\underline{\Psi}_2(M, t)|^2 \cdot dS + 2 |\underline{\Psi}_1(M, t)| |\underline{\Psi}_2(M, t)| \cos(\Delta\varphi) \cdot dS$$

soit :

$$dp = dp_1 + dp_2 + 2\sqrt{dp_1 dp_2} \cdot \cos(\Delta\varphi)$$

C'est l'analogie quantique de la formule de Fresnel. Une telle loi correspond bien aux observations : les détections se répartissent suivant une loi de probabilité dont le profil est celui de la figure d'interférences à deux ondes de Young.

Remarque :

- malgré l'analogie, une différence majeure persiste : c'est l'interprétation probabiliste des interférences quantiques, associée à la dualité onde-corpuscule, absente en optique ondulatoire
- **un électron « interfère avec lui-même » !!** C'est la fonction d'onde associée à un électron qui passe à la fois par les deux trous et qui interfère sur l'écran. L'électron est alors détecté en une position bien précise, mais qui est purement aléatoire, elle ne peut être prédite
- la phrase du dessus suggère clairement qu'en physique quantique **la notion de trajectoire d'une particule n'a plus de sens**. La fonction d'onde a une « trajectoire ». L'aspect corpusculaire apparaît uniquement lors de la détection (i.e. lors de l'interaction de la particule avec un élément extérieur, l'écran ici)
- Je n'en suis pas sûr, mais j'imagine que deux fonctions d'onde associées à deux électrons différents ne peuvent pas interférer entre elles... sinon un dispositif à division d'onde comme les de fentes d'Young ne serait pas nécessaire pour observer de telles interférences.

1.4. Relation de Planck-Einstein – Relation de de Broglie

On rappelle la valeur numérique de la constante de Planck, ainsi que la « constante réduite » :

$$h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

La relation de **Planck-Einstein** est vérifiée par les **photons ET les particules matérielles** :

$$E = \hbar\omega$$

La relation de **de Broglie** est vérifiée par les **photons ET les particules matérielles** :

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}$$

Ces deux relations suggèrent fortement qu'on associe une particule à une OPPH, puisque sont introduits une pulsation bien définie et le vecteur d'onde associé. On verra plus loin que c'est bien le cas, et l'on nomme d'ailleurs ces ondes les **ondes de de Broglie**. On montrera par contre que ces solutions ne sont pas physiques, et l'on montrera alors comment former des ondes pouvant vraiment décrire les particules.

Il existe une différence majeure entre photons et particules matérielles, c'est la relation entre :

- E et $\|\vec{p}\|$ (grandeurs corpusculaires)
- ω et $\|\vec{k}\|$ (grandeurs ondulatoires)

- ❖ En admettant que l'expression classique de l'énergie cinétique d'une particule matérielle est encore valable en physique quantique, établir la relation de dispersion dans le cas d'une particule matérielle
- ❖ En admettant que la relation de dispersion des OEM dans le vide est encore valable en physique quantique, établir la relation entre E et $\|\vec{p}\|$ pour les photons

NB : l'hypothèse consistant à transposer certaines relations de la physique classique vers la physique quantique n'est pas abusive. Cela a été un des fils directeurs de la construction de la physique quantique.

Dans toute la suite, on ne note plus les complexes avec une barre.

2. Equation de Schrödinger pour une particule libre – Etats stationnaires

2.1. Equation de Schrödinger

La fonction d'onde d'une **particule matérielle** de masse m , **non-relativiste**, placée dans un champ de force dérivant d'une **énergie potentielle** $V(\vec{r}, t)$, vérifie l'**équation de Schrödinger** :

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

- ❖ Ecrire cette équation dans le cas 1D (coordonnée x)

Cette équation est un postulat de la physique quantique. C'est l'analogie quantique de la 2^e loi de Newton. On remarque que cette équation est linéaire, ce qui est nécessaire pour que le principe de superposition soit vérifié. On remarque que c'est une équation aux dérivées partielles à *coefficients complexes*. Elle n'est pas compatible avec la relativité d'Einstein. C'est la « théorie quantique des champs » utilisée en physique des particules (LHC au CERN) qui est la théorie quantique relativiste des phénomènes physiques.

Remarques :

- c'est une équation d'ordre 1 en temps. Il suffit de connaître la fonction d'onde à l'instant initial ainsi que le potentiel auquel est soumise la particule pour connaître la fonction d'onde à tout instant
- toutes les forces fondamentales sont conservatives et sont donc associées à un potentiel (on dit plutôt « potentiel » que « énergie potentielle » en mécanique quantique), et supposer l'existence d'un tel potentiel n'est donc pas aussi restrictif qu'on pourrait le penser

Dans la suite de ce chapitre, on se limitera au cas de la **particule libre 1D**, i.e. une particule soumise à aucune force : $V(x, t) = 0$.

2.2. Etats stationnaires

On recherche une solution par séparation des variables : $\Psi(x, t) = \varphi(x)f(t)$.

- ❖ En invoquant la condition de normalisation, montrer que l'on peut s'arranger pour que $f(t) = e^{i\alpha(t)}$
- ❖ En déduire que la densité linéique de probabilité de présence est alors indépendante du temps
- ❖ En réinjectant dans l'équation de Schrödinger, montrer que $\dot{\alpha} = C^{te}$

Cette famille de solutions correspond nécessairement à des densités de probabilité indépendantes du temps, d'où l'appellation « états stationnaires ».

Par analogie formelle avec les solutions harmoniques complexes, on choisit de noter $\alpha(t) = -\omega t$. On interprète ce résultat et cette notation dans les paragraphes suivants.

2.3. Partie spatiale des états stationnaires – Equation de Schrödinger indépendante du temps

- ❖ Déduire du résultat précédent l'équation vérifiée par la partie spatiale $\varphi(x)$ de la fonction d'onde

Cette équation se nomme *équation de Schrödinger indépendante du temps*.

- ❖ Grâce au trinôme (cpx) caractéristique, en déduire la forme de $\varphi(x)$
- ❖ Montrer que la condition de normalisation impose $\omega > 0$
- ❖ Expliciter alors la fonction d'onde $\Psi(x, t)$. Cela rappelle-t-il quelque chose ?

Les états stationnaires d'une particule libre s'écrivent sous la forme d'OPPH, les « ondes de de Broglie ».

2.4. Relation de dispersion des états stationnaires – Interprétation physique

- ❖ D'après les calculs précédents, donner la relation de dispersion des états stationnaires d'une particule libre
- ❖ Etablir l'expression de la vitesse de phase. Le vide est-il dispersif pour la fonction d'onde ?
- ❖ Rappeler les relations de Einstein et de de Broglie
- ❖ La vitesse de phase semble-t-elle s'identifier à la vitesse de la particule ?

Dans le cas d'une particule libre, on remarque que la densité de probabilité est uniforme... et ne vérifie pas la condition de normalisation. Un état stationnaire n'est donc physiquement pas acceptable. La vitesse de phase ne s'identifie d'ailleurs pas à la vitesse d'une particule. On va voir qu'une somme continue d'états stationnaires permet de décrire correctement une particule.

Etats stationnaires d'une particule libre

La fonction d'onde des états stationnaires d'une particule libre sont des OPPH quantiques :

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

La densité de probabilité est indépendante du temps, d'où l'appellation « états stationnaires ». Ce sont des états d'énergie $E = \hbar\omega$ fixée.

Etats stationnaires en général

La fonction d'onde des états stationnaires d'une particule libre sont des états d'énergie (de pulsation) fixée :

$$\Psi(x, t) = \varphi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

La densité de probabilité est indépendante du temps.
La partie spatiale $\varphi(x)$ vérifie alors l'équation de Schrödinger indépendante du temps.

Etat stationnaire en mécaQ \neq onde stationnaire en phys classique

- pas nécessairement de nœuds et de ventres en mécanique quantique. Dans le cas de la particule libre, la probabilité de présence est même uniforme
- l'onde quantique est une fonction complexe, contrairement à l'onde stationnaire classique, qui est une fonction réelle de l'espace et du temps
- l'interprétation probabiliste qui permet d'associer une particule à une onde est spécifique à la quantique

Convention d'écriture

L'équation de Schrödinger n'est compatible qu'avec l'écriture $e^{-i\omega t}$.
Contrairement à la physique des ondes classique, l'écriture $e^{i\omega t}$ ne convient pas.

3. Paquet d'onde – Relation d'incertitude d'Heisenberg

3.1. La vitesse de groupe s'identifie à la vitesse de la particule

La notion de paquet d'onde a déjà été vue lors du cours sur les ondes.

- ❖ Définir ce qu'est un paquet d'onde
- ❖ Que représente la vitesse de groupe ?

On considère ci-dessous un paquet d'onde formé à partir d'une somme d'états stationnaires (OPPH de de Broglie)

- ❖ Déterminer la vitesse de groupe
- ❖ En faisant référence à la mécanique classique, montrer que la vitesse de groupe s'identifie à la vitesse de la particule

3.2. Largeurs spectrale et spatiale du paquet d'onde : relation d'incertitude d'Heisenberg

On adapte ici l'expression mathématique d'un paquet d'OPPH donné dans le cours sur les ondes. On choisit de sommer sur la pulsation spatiale plutôt que la pulsation temporelle. On considère un paquet d'onde de spectre rectangulaire, centré sur la pulsation spatiale k_0 et de largeur totale $\Delta k \ll k_0$ (spectre étroit). On suppose toutes les OPPH du paquet de même phase à l'origine, ce qui revient à supposer la densité spectrale d'amplitude A_0 réelle :

$$\Psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k/2}^{k_0 + \Delta k/2} A_0 dk \times e^{i(kx - \omega(k)t)}$$

Pour simplifier, on peut déterminer l'expression du paquet d'onde à $t = 0$. On trouve facilement :

$$\Psi(x, 0) = A_0 e^{ik_0 x} \frac{\Delta k}{2} \text{sinc} \left[\frac{\Delta k}{2} x \right]$$

- ❖ En déduire que la densité de probabilité de présence s'étale sur l'intervalle $\Delta x = \frac{4\pi}{\Delta k}$ (largeur à sa base)

Cette relation a été établie dans un cas particulier. Dans le cas général, l'étude des transformées de Fourier permet de montrer que $\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$

- ❖ Faire le lien avec la relation d'incertitude d'Heisenberg. Interpréter physiquement cette relation

Représentation d'une particule par un paquet d'onde – Relation d'incertitude d'Heisenberg

Un paquet d'onde, somme d'états stationnaires, permet de décrire correctement l'état mécanique d'une particule.

La vitesse de groupe s'identifie à la vitesse de la particule.

La relation d'Heisenberg apparaît alors comme une conséquence math des transformées de Fourier.

L'interprétation physique de cette relation est, elle, propre à la physique quantique :

*on ne peut pas connaître **simultanément et avec une précision arbitraire***

la position et la quantité de mouvement d'une particule :

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Remarque : limite classique

Les indéterminations sur la position et la quantité de mouvement d'une particule sont numériquement extrêmement faibles à l'échelle macroscopique, car de l'ordre de la constante de Planck. C'est pourquoi, dans de nombreuses situations, la théorie classique de Newton suffit pour décrire le mouvement d'une particule. Quand le paquet d'onde représentant l'état de la particule est d'extension très petite devant les autres dimensions du problème (détecteur par exemple), alors on peut le considérer ponctuel : on retrouve le modèle du point matériel.

3.3. Courant de probabilité pour une particule libre

- ❖ Par analogie avec le transport convectif, définir mathématiquement \vec{j} le débit surfacique de probabilité de présence d'une particule, en fonction (entre autres) de Ψ , \vec{k} et m

La partie « **Approche ondulatoire de la mécanique quantique** » présente quelques-unes des notions associées à une description ondulatoire de ce domaine. La démarche adoptée, volontairement modeste, est centrée sur un approfondissement des notions introduites en première année que sont la dualité onde-corpuscule et l'inégalité de Heisenberg spatiale, les objectifs étant désormais quantitatifs. Il s'agit, sur des systèmes unidimensionnels et des situations physiques simplifiées d'envisager quelques conséquences qui découlent de cette description ondulatoire : l'effet tunnel et ses applications sont ainsi discutés comme aboutissement naturel des notions abordées dans cette partie. Elle est ancrée dans le réel : on insiste sur le fait que les situations envisagées décrivent des systèmes physiques réels effectivement unidimensionnels

Toute discussion autour de la mesure et de ses effets sur un système est exclue, de même que toute introduction au spin. L'accent est mis avant tout sur la mise en équations des situations physiques proposées à l'aide des outils de la physique des ondes, et sur la discussion graphique des résultats qui en découlent. Tout développement des calculs intermédiaires est donc naturellement proscrit et les expressions sur lesquelles s'appuient les discussions qualitatives doivent être fournies.

Le courant de probabilité est introduit dans un contexte restreint avec pour seul objectif d'exprimer le coefficient de transmission d'une barrière de potentiel.

6.5. Approche ondulatoire de la mécanique quantique	
6.5.1. Amplitude de probabilité	
Fonction d'onde $\psi(x,t)$ associée à une particule dans un problème unidimensionnel. Densité linéique de probabilité de présence.	Normaliser une fonction d'onde. Relier qualitativement la fonction d'onde à la notion d'orbitale en chimie.
Principe de superposition. Interférences.	Relier la superposition de fonctions d'ondes à la description d'une expérience d'interférences entre particules.
6.5.2. Équation de Schrödinger pour une particule libre	
Équation de Schrödinger.	Utiliser l'équation de Schrödinger fournie.
États stationnaires.	Associer les états stationnaires aux états d'énergie déterminée. Établir et utiliser la forme $\psi(x,t) = \phi(x) \exp(-iEt/\hbar)$ pour la fonction d'onde d'un état stationnaire et l'associer à la relation de Planck-Einstein. Distinguer l'onde associée à un état stationnaire en mécanique quantique d'une onde stationnaire au sens usuel de la physique des ondes.
Paquet d'ondes associé à une particule libre. Relation $\Delta k_x \Delta x \geq 1/2$.	Utiliser l'équation de Schrödinger pour déterminer la partie spatiale $\phi(x)$ des fonctions d'onde stationnaires décrivant une particule libre. Identifier la vitesse d'une particule libre et la vitesse du paquet d'ondes la décrivant. Exploiter l'inégalité de Heisenberg pour relier l'étendue spatiale et l'étendue spectrale du paquet d'ondes décrivant une particule libre.
Courant de probabilité associé à une particule libre.	Utiliser l'expression admise du courant de probabilité associé à une particule libre et l'interpréter comme un produit densité*vitesse.