CHAPITRE XXI

FONCTION D'ONDE D'UN OBJET QUANTIQUE - EQUATION DE SCHRÖDINGER

Sommaire

I Fondements de la mécanique quantique : la fonction d'onde complexe

I.1 L'expérience de Davisson et Germer (1927)

<u>Principe :</u> bombardement d'une cible de Nickel cristallin par un faisceau d'électrons :

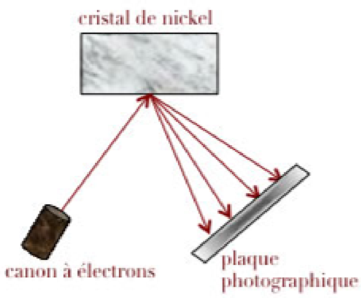

Figure XXI.1 – Expérience de Davisson et Germer : vue générale (1927)

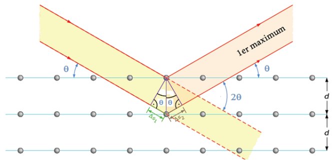

Figure XXI.2 – Expérience de Davisson et Germer : interférences constructives avec des électrons

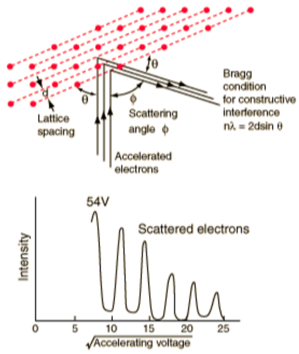

Figure XXI.3 – Expérience de Davisson et Germer : longueur d'onde et vitesse

<u>Observations :</u>

- fig.1 : "Fragmentation" du faisceau d'électrons avec **directions privilégiées d'émergence.**

- fig.2 : Directions privilégiées d'émergence données par une lois de type "interférences constructives".

  Dans le cas où l'on considère des ondes lumineuses, la condition d'interférences constructives entre deux ondes réfléchies par deux plans d'atomes superposés est (idem réseau) :

$$\underbrace{\delta}_{diff.marche} = \Delta s_1 + \Delta s_2 = 2d\sin\theta = K\lambda \quad \text{(Formule de Bragg)}$$

$$\boxed{\text{Davisson et Germer observent le même comportement mais avec un faisceau d'électrons}}$$

  ▶ Conclusion : **prouve que les électrons possèdent des propriétés ondulatoires $\Longrightarrow$ Idée : il existe une longueur d'onde λ associée à une particule.**

- fig.3 : On fixe la position angulaire du détecteur d'électrons émergents θ, et on modifie la vitesse des électrons incidents par modification de la tension accélératrice, $\Rightarrow$ les interférences constructives interviennent pour des valeurs déterminées de la tension accélératrice et donc de la vitesse d'incidence.

$$\underbrace{2d\sin\theta}_{=cste} = K\lambda = \underbrace{f(v)}_{???}$$

  ▶ Conclusion : **prouve que la vitesse des électrons est liée à la longueur d'onde des particules $\Rightarrow$ cf plus bas Relation de Louis De Broglie.**

A retenir : les électrons ont propriétés ondulatoires, et à priori une longueur d'onde associé $\Longrightarrow$ existence d'une fonction d'onde !!!

I.2 Emergence de la fonction d'onde complexe

a - Le premier prostulat de la mécanique quantique

COMMENTAIRES : (TOUJOURS À PROPOS DES FIGURE 1,2,3)

- Les électrons de masse m_e et de vitesse déterminée par le dispositif (canon) impactent les détecteurs et **l'on peut compter les impacts** $\Longrightarrow$ **propriétés corpusculaires** ("boule billard")
- Les électrons diffractent et interfèrent au même titre que les ondes lumineuses $\Longrightarrow$ **propriétés ondulatoires** en plus de leur caractère corpusculaire.
- Ces deux descriptions de la matière possèdent des propriétés incompatibles en apparence :

	Localisation "exacte" (déterministe)	Quantité de mouvement (classique !)	Diffraction/interférences
Description ondulatoire	NON	NON	OUI
Description corpusculaire	OUI	OUI	NON

CONCLUSIONS :

$\Rightarrow$ Aucune des deux représentations classiques **seule**, **corpusculaire** ou **ondulatoire**, n'est correcte, et il est **impossible de disposer de deux modèles qui s'exclut l'un l'autre** pour représenter la même entité physique, l'électron.

QUESTION : Existe-t-il une théorie de "synthèse" réconciliant ces deux visions de la matière ?

RÉPONSE : Louis de Broglie pose en 1923 le premier postulat de la mécanique quantique (appelée également mécanique ondulatoire).

On garde la notion particulaire, mais **sans localisation précise** i.e. on abandonne le caractère déterministe de la mécanique, et on **ajoute le caractère ondulatoire** $\Longrightarrow$

PROPRIÉTÉ - (I.2) - 1:

POSTULAT N°1 : *A toute particule matérielle (électron, proton neutron etc...) est associée une* **fonction d'onde complexe** *contenant toute l'information sur celle-ci (si elle est seule dans l'espace !!!) et décrivant son état physique :*

$$\psi(\overrightarrow{r},t) \tag{XXI.1}$$

On **impose** *à la fonction d'onde d'assurer que la* **probabilité élémentaire** $dP(\overrightarrow{r},t)$ *de trouver la particule dans un volume* $d\tau(\overrightarrow{r})$ *autour de la position* $\overrightarrow{r}$ *soit donnée par :*

$$\boxed{dP(\overrightarrow{r},t) = |\psi(\overrightarrow{r},t)|^2 \cdot d\tau(\overrightarrow{r})}$$

b - Dualité onde corpuscule

En 1923 : Louis de Broglie traduit cette bivalence onde-corpuscule en réalisant une courageuse analogie avec l'optique ondulatoire. En voici l'idée principale :

HYPOTHÈSES : on suppose une particule en mouvement en absence de toute force extérieure $\Longrightarrow$ mouvement rectiligne uniforme en "vision" corpusculaire.

- S'il existe une onde associée à la particule, elle se déplace de la même manière que celle-ci, soit en ligne droite $\Longrightarrow$ Louis de Broglie pose onde associée de type **onde plane** de forme :

$$\psi(\overrightarrow{r},t) = A \cdot e^{j(\overrightarrow{k}\cdot\overrightarrow{r}-\omega t)} \qquad \begin{cases} \overrightarrow{k} = k \cdot \overrightarrow{i} \\ \text{avec } \overrightarrow{i} \text{ direction de déplacement de la particule} \end{cases}$$

- Comme pour le photon, on lie l'énergie de la particule (on la supposera non relativiste dans le cadre de ce cours) à la fréquence de l'onde associée par la relation du quantum de Planck :

$$E = \hbar\omega = \frac{1}{2}mv^2 \quad \text{avec } \overrightarrow{v} = v \cdot \overrightarrow{i} \text{ vitesse de la particule}$$

Si une vitesse d'onde doit être associée à la particule, c'est assez naturellement **la vitesse de groupe** (et non la vitesse de phase dont on sait déjà qu'elle ne revêt pas de signification physique dans le cas des ondes électromagnétiques[1]). On a :

$$v = v_g = \frac{d\omega}{dk} \rightarrow v = \frac{d\omega}{dv} \times \frac{dv}{dk}$$

La relation du quantum de Planck donne par ailleurs : $\dfrac{d\omega}{dv} = \dfrac{mv}{\hbar}$

Donc :

$$v = \frac{mv}{\hbar} \times \frac{dv}{dk} \Longrightarrow \hbar \cdot dk = m \cdot dv$$

En supposant finalement que $k = 0$ si $v = 0$ ($\lambda \rightarrow \infty \rightarrow$ pas d'énergie), l'intégration donne la **relation de De Broglie** qui établit le lien entre les descriptions ondulatoire et corpusculaire d'une particule :

PROPRIÉTÉ - (I.2) - 2:

A toute particule libre non relativiste est associée une onde "de matière" de type OPPH appelée **onde de De Broglie** *ou ODDB, et dont le vecteur d'onde est lié à la quantité de mouvement par la relation dite de "dualité onde-corpuscule" :*

$$\boxed{\textit{Dualité onde corpuscule} \Leftrightarrow \left[\begin{array}{c} \hbar\overrightarrow{k} = m\overrightarrow{v} = \overrightarrow{p} \\ ou \\ \dfrac{h}{\lambda}\cdot\overrightarrow{i} = \overrightarrow{p} \end{array}\right.}$$

avec λ longueur d'onde associée à la particule.

1. il faudra donc très probablement que nous reparlions de la notion de paquet d'ondes.

I.3 Calcul de l'action : "critère" quantique

QUESTION : quand doit-on considérer qu'un objet possède un comportement quantique ?

RÉPONSE :
on doit comparer l'action de ce dernier au quantum d'action de Planck : $h = 6,62.10^{-34}\ J.s$, qui constitue le plus petit quantum d'action.

Par définition, l'action est le produit d'une quantité de mouvement caractéristique p_c par une longueur caractéristique L_c du système :

$$\mathcal{S} \simeq p_c \times L_c$$

PROPRIÉTÉ - (I.3) - 3:

Critère quantique d'un système d'action $\mathcal{S}$:
NB : *la constante de planck $h = 6,62.10^{-34}\ J.s$ est homogène à une action et elle correspond à la plus petite action indivisible (quantum d'action).*

$$\left[\begin{array}{l} \mathcal{S} = p_c \times L_c >> h \Longrightarrow \text{ le système est classique} \\ \\ \mathcal{S} = p_c \times L_c \sim h \Longrightarrow \text{ le système est quantique} \end{array}\right.$$

REMARQUE - (I.3) - 1:

Autre formulation en terme de longueur d'onde :
comme $p_c = \hbar k_c = \dfrac{h}{\lambda_c}$, on a : $\left[\begin{array}{l} L_c >> \lambda = \dfrac{h}{p_c} \Longrightarrow \text{ classique} \\ L_c \sim \lambda = \dfrac{h}{p_c} \Longrightarrow \text{ quantique} \end{array}\right.$

QUELQUES ORDRES DE GRANDEUR POUR LA LONGUEUR D'ONDE DE MATIÈRE :

Système	masse (kg)	vitesse $(m.s^{-1})$	$L_c\ (m)$	$\frac{\mathcal{S}}{h}$	class./quant.
élève dans couloir	70	1	1	10^{35}	class.
hématie dans capillaire sanguin	10^{-16}	10^{-1}	10^{-4}	10^{12}	class.
Electron dans un cristal	$9,1.10^{-31}$	10^{-4}	10^{-10}	$10^{-3} << 1$	quantique!!!

A RETENIR :

PROPRIÉTÉ - (I.3) - 4:

Les particules atomiques et subatomiques, ont un comportement quantique. Plus généralement, tous les systèmes de taille comparable aux dimensions atomiques sont quantiques.

I.4 Densité de probabilité de présence - normalisation de la fonction d'onde

a - Définition

Compte tenu de l'expression de la probabilité de trouver une particule quantique dans un volume $d\tau(\overrightarrow{r})$ autour de la position $\overrightarrow{r}$:

$$dP(\overrightarrow{r},t) = |\psi(\overrightarrow{r},t)|^2 \cdot d\tau(\overrightarrow{r})$$

on définit la **densité de probabilité de présence** de la particule par :

Propriété - (I.4) - 5:

$$\rho(\overrightarrow{r},t) = \frac{dP(\overrightarrow{r},t)}{d\tau} = |\psi(\overrightarrow{r},t)|^2$$

b - Condition de normalisation - exemple d'exploitation

Dans la mesure où la particule existe, elle doit se trouver quelque part dans tout l'espace. Ainsi, la somme des probababilités élémentaires sur tout l'espace **doit obligatoirement valoir l'unité à tout instant**. On appelle cela la condition de normalisation :

Propriété - (I.4) - 6:

$$\textit{Condition de normalisation} \Leftrightarrow \int_{espace} dP(\overrightarrow{r},t) = \int_{espace} |\psi(\overrightarrow{r},t)|^2 \cdot d\tau(\overrightarrow{r}) = 1$$

Cas important 1D (pédagogique !) : *si l'on suppose que l'espace accessible au système quantique (particule) est réduit à un axe $(x'x)$, alors la relation précédente devient :*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 \cdot dx = 1$$

Conséquence : $\lim_{x\to\pm\infty} |\psi(x,t)| = 0$

Utilité : permet de déterminer l'amplitude de l'ODDB associée à une particule.

Exemple : supposons une particule décrite par la fonction d'onde suivante

$$\psi(x,t) = A \cdot e^{j\omega t - \alpha|x|} \quad \text{avec } \alpha \in \mathbb{R}$$

Condition de normalisation : $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 \cdot dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 \cdot dx = |A|^2 \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha|x|} \cdot dx = 1$
soit :

$$2|A|^2 \int_0^{+\infty} e^{-2\alpha|x|} \cdot dx = -2\frac{|A|^2}{2\alpha}\left[-e^{-2\alpha|x|}\right]_0^{+\infty} = \frac{|A|^2}{\alpha} = 1$$

Donc : $\boxed{A = \sqrt{\alpha} \cdot e^{j\varphi}}$ avec $\varphi = cste$ quelconque

c - Mesure d'une valeur moyenne d'"observable"

Soit une grandeur quelconque caractéristique du système $\mathcal{A}$ (position, quantité de mouvement, moment cinétique etc...). En théorie des probabilités discrètes, si p_i représente la probabilité que l'observable prenne la valeur $\mathcal{A}_i$, sa valeur moyenne est :

$$< \mathcal{A} >= \sum_i p_i \mathcal{A}_i$$

Dans le cas d'un système quantique, la loi de probabilité est continue donc :

PROPRIÉTÉ - (I.4) - 7:

La valeur moyenne d'un observable $\mathcal{A}$ d'un système quantique est :

$$< \mathcal{A} >= \int_{espace} \mathcal{A} \cdot dP = \int_{espace} \mathcal{A} \cdot |\psi(\overrightarrow{r}, t)|^2 \cdot d\tau(\overrightarrow{r})$$

Exercice de cours: **(I.4) - n° 1** *Déterminer la valeur moyenne de la position de la particule précédente de fonction d'onde* $\psi(x,t) = A \cdot e^{j\omega t - \alpha|x|}$

II L'équation de Schrödinger 1D non relativiste (ES1D)

II.1 Cas d'une particule libre

HYPOTHÈSES :

- Particule libre de se déplacer sur un axe par exemple $(x'x) \Rightarrow \psi(x,t) = A \cdot e^{j(kx - \omega t)}$.
- D'après la dualité onde-corpuscule en posant $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$: $k = \dfrac{2\pi p}{h} = \dfrac{mv}{\hbar}$
- D'après la relation de Planck-Einstein : $E = h\nu = \hbar\omega$ soit : $\omega = \dfrac{E}{\hbar}$
- L'énergie de la particule limitée à l'énergie cinétique puisque cette dernière est libre est : $E_c = E = \dfrac{1}{2}mv^2 = \dfrac{p^2}{2m} = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$
  soit : $\dfrac{E_c}{k^2} = \dfrac{E}{k^2} = \dfrac{\hbar^2}{2m}$

IDÉE : on tente de bâtir une équation spatio-temporelle aux dérivées partielles régissant l'évolution de la fonction d'onde $\psi(x,t)$:[2], à l'instar de l'EDA régissant les propagations non dispersives en physique classique :

2. cette initiative est assez naturelle si l'on considère le caractère ondulatoire de la particule, comme pour une recherche d'EDA par exemple !

On peut par exemple calculer $\dfrac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -j\omega\psi(x,t) = -j\dfrac{E}{\hbar}\psi(x,t)$ soit :

$$\psi(x,t) = j\frac{\hbar}{E}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

et également : $\dfrac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = -k^2\psi(x,t)$ soit :

$$\psi(x,t) = -\frac{1}{k^2}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}$$

En rapprochant ces deux dernières expressions de $\psi(x,t)$ on en déduit :

$$-\frac{1}{k^2}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = j\frac{\hbar}{E}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

soit : $-\dfrac{E}{k^2}\dfrac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = j\hbar\dfrac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$
et finalement l'équation de Schrödinger 1D pour une particule libre :

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = j\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}} \tag{XXI.2}$$

II.2 Cas général : l'ES1D - particule en présence d'un champ de force (postulat n°2)

Dans certaines situations que nous traiterons, la particule sera soumise à un champ de force conservative, engendrant de fait l'existence d'une énergie potentielle $V(\overrightarrow{r})$.

Nous envisageons encore ici le cas d'une particule contrainte de se déplacer sur un axe $(x'x)$, aussi le potentiel sera uniquement fonction de la variable x.

Reprenons la relation établie dans le paragraphe précédent sur la dérivée seconde spatiale de $\psi(x,t)$:

$$\psi(x,t) = -\frac{1}{k^2}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}$$

Avec $\dfrac{1}{k^2} = \dfrac{\hbar^2}{2mE_c}$ elle devient (cette fois l'énergie cinétique n'est pas remplacée par l'énergie totale) :

$$\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2mE_c}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} \quad \text{soit :} \quad E_c\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}$$

La relation sur la dérivée première temporelle demeure en revanche inchangée :

$$\psi(x,t) = j\frac{\hbar}{E}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} \quad \text{soit :} \quad E\psi(x,t) = j\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

Enfin, la conservation de l'énergie mécanique permet d'écrire :

$$E = E_c + V$$

soit en multipliant simplement par $\psi(x,t)$:

$$E\cdot\psi(x,t) = E_c\cdot\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t)$$

En injectant les deux relations établies plus haut, on obtient l'équation de Schrödinger 1D généralisée :

Propriété - (II.2) - 8:

Postulat n°2 : *la fonction d'onde $\psi(x,t)$ d'un système quantique soumis à un champ d'énergie potentielle $V(x)$ vérifie l'équation de Schrödinger non relativiste 1D (ES1D) :*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\cdot\psi(x,t) = j\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} \tag{XXI.3}$$

Cette équation se généralise à 3D avec :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\overrightarrow{r},t) + V(\overrightarrow{r})\cdot\psi(\overrightarrow{r},t) = j\hbar\frac{\partial\psi(\overrightarrow{r},t)}{\partial t} \tag{XXI.4}$$

Remarque - (II.2) - 2:

- On peut définir $\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right] = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)\right]$ l'opérateur Hamiltonien du système, permettant d'écrire l'ES1D sous forme plus synthétique avec :

$$\hat{H}\psi(\overrightarrow{r},t) = j\hbar\frac{\partial\psi(\overrightarrow{r},t)}{\partial t}$$

- L'équation de Schrödinger faisant intervenir la dérivée seconde de $\psi(x,t)$ par rapport à l'espace, cela impose une continuité spatiale de la fonction d'onde et au moins de sa dérivée première.

II.3 Linéarité de l'ES- superposition des états quantiques

Propriété - (II.3) - 9:

L'équation de Schrödinger est linéaire.

Conséquence : toute combinaison linéaire de solutions est également solution :

$$\{\psi_1(\overrightarrow{r},t), \psi_2(\overrightarrow{r},t), \ldots, \psi_n(x,t)\} \text{ solutions de l'ESR} \quad \Longrightarrow \quad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i\psi_i(\overrightarrow{r},t) \text{ solutions de l'ES}$$

Expérience : on réalise l'expérience des fentes d'Young avec une source d'électrons (canon à électrons).
Commentaires : les électrons interfèrent au même titre que les ondes lumineuses !!!

Question : description de l'interférence à l'aide des fonctions d'onde ?

Réponse : **par superposition des états !** (postulat n°3)

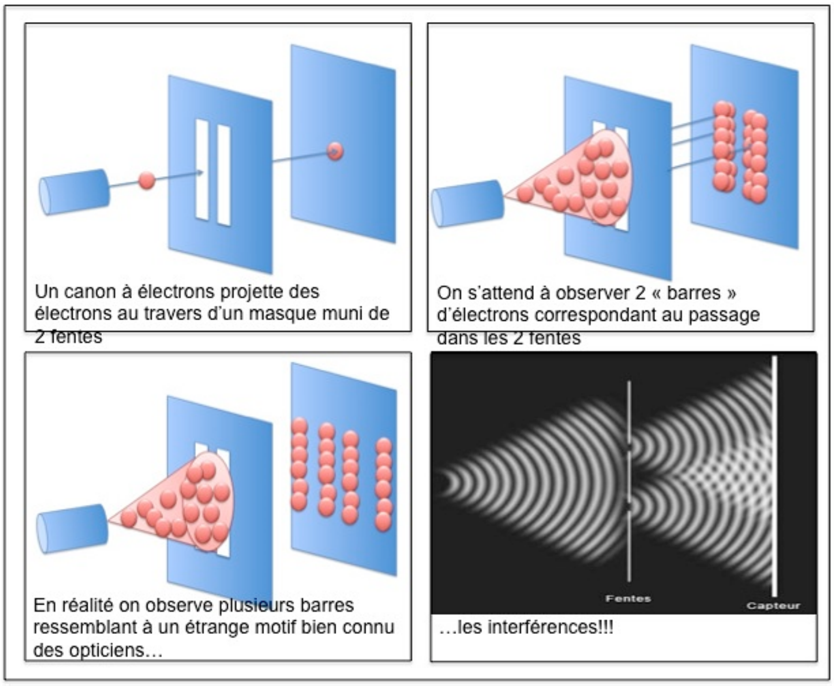

FIGURE XXI.4 – Expérience des fentes d'Young réalisée avec des électrons - résultats

On appelle : $\begin{cases} \psi_g(M,t) \text{fonction d'onde d'un électron passant par la fente gauche, fente droite fermée} \\ \psi_d(M,t) \text{fonction d'onde d'un électron passant par la fente droite fente, gauche fermée} \end{cases}$

La fonction d'onde d'un électron lorsque les deux fentes sont ouvertes est obtenue par **superposition des états quantiques $\psi_g(M,t)$ et $\psi_d(M,t)$** :

$$\psi(M,t) = \alpha_g \cdot \psi_g(M,t) + \alpha_d \cdot \psi_d(M,t)$$

Ainsi, la densité de probabilité de l'électron autour du point M est donnée (propriété 5) par :

$$\rho(M,t) = |\psi(M,t)|^2 = |\alpha_g \cdot \psi_g(M,t) + \alpha_d \cdot \psi_d(M,t)|^2$$

soit :

$$\begin{aligned} \rho(M,t) = & \overbrace{|\alpha_g \cdot \psi_g(M,t)|^2}^{\text{électron passant par fente gauche}} + \overbrace{|\alpha_d \cdot \psi_d(M,t)|^2}^{\text{électron passant par fente gauche}} \\ & + \underbrace{\left(\alpha_g \alpha_d^* \cdot \psi_g(M,t) \cdot \psi_d^*(M,t) + \alpha_g^* \alpha_d \cdot \psi_g(M,t)^* \cdot \psi_d(M,t)\right)}_{\text{terme "d'interférences quantiques"}} \end{aligned} \tag{XXI.5}$$

REMARQUE - (II.3) - 3:

Par analogie avec l'optique, on donne parfois le nom d'**amplitude de probabilité** à la fonction $\psi(M,t)$. Cependant, il faut bien retenir que seul le carré du module de la fonction d'onde possède une signification physique.

Exercice de cours: **(II.3) - n° 2** *Supposons deux états quantiques normés d'une particule ψ_1 et ψ_2 solutions de l'équation de Schrödinger. On suppose que ces deux états sont orthogonaux i.e. leur produit scalaire (produit scalaire hermitien) est nul :*

$$\int_{espace} \psi_1^*(\vec{r},t) * \cdot \psi_2(\vec{r},t) \cdot d\tau = 0$$

On bâtit les états quantiques suivants par superposition :

$$\begin{cases} \psi_+(\vec{r},t) = \alpha_1(\psi_1(\vec{r},t) + \psi_2(\vec{r},t)) \\ \psi_-(\vec{r},t) = \alpha_2(\psi_1(\vec{r},t) - \psi_2(\vec{r},t)) \end{cases}$$

❶ *Calculer les constantes α_1 et α_2*

❷ *Montrer que les deux états $\psi_+(\vec{r},t)$ et $\psi_-(\vec{r},t)$ sont orthogonaux.*

III Recherche des états stationnaires 1D

III.1 Recherche par séparation de variables - Equation de Schrödinger indépendante du temps (ESIT1D) (à retenir ! ! !)

On cherche à résoudre l'ES1D de la fonction d'onde d'un système quantique dans le cadre d'hypothèses simplificatrices.

<u>Hypothèses :</u>
- potentiel indépendant du temps : $V(x)$.....
- .... donc : énergie mécanique conservée : $E = cste$

⇒ **on recherche les états d'énergie E constante appelés états stationnaires.**

> Propriété - (III.1) - 10:
>
> *Un système quantique soumis à un potentiel indépendant du temps $V(x)$ possèdent des états pour lesquels l'énergie est constante. Ces états sont nommés* **états stationnaires**

Idée : on recherche des solutions à variables x et t séparées, comme pour les états stationnaires ondulatoires classiques (corde de Melde, résonance d'une cavité électromagnétique 1D) :

$$\psi(x,t) = \chi(t) \cdot \varphi(x)$$

On injecte cette forme dans l'ES1D :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \chi(t)\varphi(x)}{\partial x^2} + V(x)\cdot\chi(t)\varphi(x) = +j\hbar\frac{\partial\chi(t)\varphi(x)}{\partial t}$$

qui devient en divisant membre à membre par $\chi(t)\cdot\varphi(x)$:

$$\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\varphi"(x)}{\varphi(x)} + V(x)\right]}_{\text{ne dépend que de x}} = \underbrace{+j\hbar\frac{\chi'(t)}{\chi(t)}}_{\text{ne dépend que de t}}$$

Les deux membres de cette équation étant égaux, mais à priori dépendant de variables différentes, ils doivent être égaux à une même constante. Appelons E cette constante ; il vient alors les deux équations suivantes :

$$\left[\begin{array}{c} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\varphi"(x)}{\varphi(x)}+V(x)=E \\ \\ j\hbar\dfrac{\chi'(t)}{\chi(t)}=E \end{array}\right. \Rightarrow \left[\begin{array}{c} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\varphi"(x)+V(x)\varphi(x)=E\varphi(x) \\ \\ \dfrac{\chi'(t)}{\chi(t)}=-j\dfrac{E}{\hbar} \end{array}\right.$$

La première équation porte le nom d'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$\boxed{\text{Equation de Schrödinger indépendante du temps} \quad \Leftrightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi"(x)+V(x)\varphi(x)=E\varphi(x)}$$

et la seconde équation se résoud immédiatement avec :

$$\boxed{\chi(t)=A\cdot e^{-j\dfrac{Et}{\hbar}}}$$

Finalement l'état stationnaire va s'écrire en incluant la constante A dans $\varphi(x)$:

$$\boxed{\psi(x,t)=\varphi(x)\chi(t)=\varphi(x)\cdot e^{-j\dfrac{Et}{\hbar}}}$$

Signification de E :

Cette solution correspond à une évolution temporelle harmonique à la pulsation $\omega=\dfrac{E}{\hbar}$, ce qui permet, avec la relation de Planck $E=\hbar\omega$, d'identifier E **avec l'énergie de l'état stationnaire**.

Conséquence : (à retenir !!!)

Propriété - (III.1) - 11:

La fonction d'onde d'un état stationnaire d'énergie E s'écrit :

$$\psi(x,t)=\varphi(x)\cdot e^{-j\dfrac{Et}{\hbar}}$$

et la densité de probabilité de présence associée est indépendante du temps :

$$\rho_{Etat.St}(x,(t))=|\psi(x,t)|^2=|\varphi(x)|^2\neq fct(t)$$

III.2 Etats stationnaires classiques et quantiques : différence de signification

Reprenons le cas d'une particule quantique libre, c'est à dire soumise à un potentiel nul $V=0$. L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi"(x)=E\varphi(x)$$

Solutions : $\varphi(x) = A \cdot e^{+j\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} + B \cdot e^{-\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x}$

REMARQUE - (III.2) - 4:

On exclut dans cette étude le cas $E < 0$ conduisant à des exponentielles d'arguments réels évanescente ou bien divergente.

La solution complète est donc pour une énergie E donnée :

$$\psi(x,t) = A \cdot e^{j\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x - \frac{Et}{\hbar}\right)} + B \cdot e^{j\left(-\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x - \frac{Et}{\hbar}\right)}$$

Si nous retenons par exemple l'onde particulière pour laquelle $B = 0$, soit : $\psi(x,t) = A \cdot e^{j\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x - \frac{Et}{\hbar}\right)}$

alors sa formulation d'onde donne lieu à deux interprétations :

- **point de vue quantique :** cette fonction d'onde est bien celle d'un état stationnaire puisque $\rho(x,t?) = |\psi(x,t)|^2 = |A^2| \neq fct(t)$
- **point de vue classique :** cette fonction d'onde est celle d'une onde progressive se déplaçant dans le sens des x croissants.

CONCLUSION : la notion de d'état stationnaire ne recouvre pas la même signification suivant qu'elle est évoquée d'un point de vue quantique ou classique.

REMARQUE - (III.2) - 5:

Alors que la notation complexe est une commodité d'écriture des ondes progressives harmoniques, **les fonctions d'onde de systèmes quantiques sont intrinsèquement complexes.**

III.3 Superposition d'ES : construction d'un état non nécessairement stationnaire

PROPRIÉTÉ - (III.3) - 12:

POSTULAT N°3 : *les fonctions d'onde $\psi(x,t)$ des états stationnaires de l'énergie d'un système quantique constituent une base orthonormé de l'espace des fonctions d'onde (Espace de Hilbert).*

Conséquence : tout état quelconque d'un système $\Phi(x,t)$ (donc non nécessairement stationnaire) est décomposable sur la base des états stationnaires $\psi_i(x,t) = \varphi_i(x) \cdot e^{-j\frac{E_i t}{\hbar}}$ avec :

$$\boxed{\Phi(x,t) = \sum_i \alpha_i \cdot \varphi_i(x) \cdot e^{-j\frac{E_i t}{\hbar}}}$$

EXEMPLE : **superposition de deux états stationnaires ⇒ description d'un état non stationnaire**

Soient deux états stationnaires d'énergies respectives E_1 et E_2 et de fonctions d'onde : $\left[\begin{array}{l}\psi_1(x,t)=\varphi_1(x)\cdot e^{-j\dfrac{E_1 t}{\hbar}}\\ \psi_2(x,t)=\varphi_1(x)\cdot e^{-j\dfrac{E_2 t}{\hbar}}\end{array}\right.$ d'un système quantique quelconque.

Une combinaison linéaire de ces deux états est par exemple :

$$\psi(x,t)=\alpha_1\cdot\psi_1(x,t)+\alpha_2\cdot\psi_2(x,t)\quad\text{avec } \alpha_1 \text{ et } \alpha_2 \text{ potentiellement complexes.}$$

La densité de probabilité de présence de cet état est :

$$\begin{aligned}\rho(x,t)=|\psi(x,t|^2 &= [\alpha_1\cdot\psi_1(x,t)+\alpha_2\cdot\psi_2(x,t)]\times[\alpha_1^*\cdot\psi_1^*(x,t)+\alpha_2^*\cdot\psi_2^*(x,t)]\\ &=|\alpha_1|^2|\varphi_1(x)|^2+|\alpha_2|^2|\varphi_2(x)|^2+\alpha_1\alpha_2^*\varphi_1(x)\varphi_2^*(x)\cdot e^{j\dfrac{(E_2-E_1)t}{\hbar}}+\alpha_1^*\alpha_2\varphi_1^*(x)\varphi_2(x)\cdot e^{-j\dfrac{(E_2-E_1)t}{\hbar}}\end{aligned}$$

soit :

$$\rho(x,t)=\overbrace{|\alpha_1|^2\rho_1(x)+|\alpha_2|^2\rho_2(x)+2}^{=fct(x)}\underbrace{\mathcal{R}_e\left[\alpha_1\alpha_2^*\varphi_1(x)\varphi_2^*(x)\cdot e^{j\dfrac{(E_2-E_1)t}{\hbar}}\right]}_{=\mathbf{fct(t)}}$$

Le terme entre crochets est une fonction du temps ce qui assure le caractère non stationnaire de l'état quantique ainsi composé par superposition.

On peut poser que $\alpha_1\alpha_2^*\varphi_1(x)\varphi_2^*(x)=K\cdot e^{j\theta}$ (avec K positif) ; ainsi le terme "interférentiel" peut s'écrire :

$$2\mathcal{R}_e\left[\alpha_1\alpha_2^*\varphi_1(x)\varphi_2(x)\cdot e^{j\dfrac{(E_2-E_1)t}{\hbar}}\right]=2\mathcal{R}_e\left[K\cdot e^{j\left(\dfrac{(E_2-E_1)t}{\hbar}+\theta\right)}\right]=2K\cdot\cos\left(\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}+\theta\right)$$

INTERPRÉTATION :

Cet état quantique possède une densité de probabilité de présence qui évolue de manière harmonique du temps, avec pour x donné, une alternance de moments où la particule est "présente" soit pour $\dfrac{(E_2-E_1)t}{\hbar}+\theta=2p\pi$ et de moments où la particule est absente pour $\dfrac{(E_2-E_1)t}{\hbar}+\theta=(2p+1)\pi$. Ce système est donc bien en évolution au cours de temps.

IV Etude complète de la particule libre

IV.1 Fonction d'onde d'une particule libre non localisée : caractère non physique des ondes de De Broglie

Le cours d'électromagnétisme a été l'occasion de montrer le caractère non physique des ondes de type OPPH, incapables de décrire les phénomènes de propagation réels ; elles présentaient notamment deux défauts :

- Incapables de décrire la structure des phénomènes propagatifs réels, à savoir **limités dans le temps et l'espace**.
- L'intégration de leur densité volumique d'énergie se faisant sur un espace illimité, l'énergie totale d'une OPPH est infini :

$$< \epsilon_{em}(OPPH) >= \iiint_{-\infty}^{+\infty} u_{em} \cdot d\tau = \iiint_{-\infty}^{+\infty} \frac{\epsilon_0 E_0^2}{4} \cdot d\tau \rightarrow \infty$$

Question : les ondes ("de matière") de De Broglie, d'expressions analogues à celles des OPPH présentent-elles des "anomalies" ?

Posons une onde de De Broglie d'expression :

$$\psi(x,t) = A \cdot e^{j(kx-\omega t)}$$

et tentons de la normaliser :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x,t) \cdot dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 \cdot dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |A^2| \cdot dx = |A^2| \int_{-\infty}^{+\infty} dx = +\infty \quad \Longrightarrow \quad \textbf{normalisation impossible!!!}$$

A retenir :

> Propriété - (IV.1) - 13:
>
> *Les ondes de De Broglie, analogues à des OPPH ne sont pas normalisables, et de fait ne peuvent représenter l'état d'un système quantique réel.*

IV.2 Construction d'une onde "physique" pour la particule libre : le paquet d'onde !!!

Idée : on souhaite bâtir par superposition d'ondes de De Broglie une onde capable de représenter l'état physique d'une particule réelle.

Comme dans le cours d'électromagnétisme :

- Avec deux ondes de De Broglie :

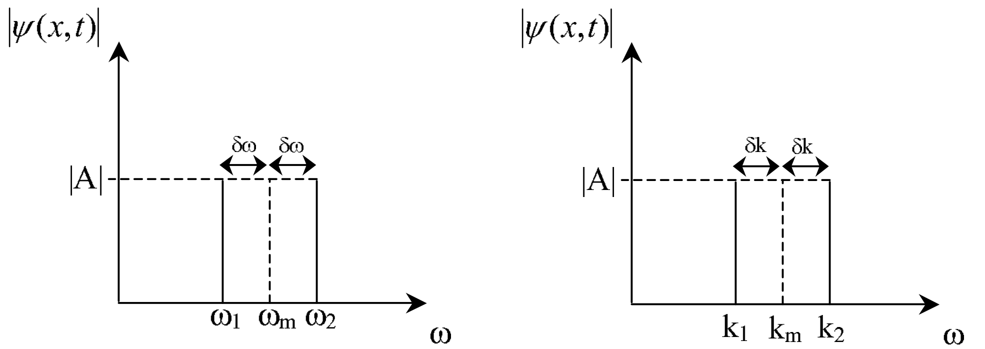

Figure XXI.5 – Représentation spectrale d'un "paquet" de deux ondes de De Broglie

$$\psi(x,t) = \psi_1(x,t) + \psi_2(x,t) = A\left[e^{j(k_1x-\omega_1 t)} + e^{j(k_2 x-\omega_2 t)}\right] = A\left[e^{j((k-\delta k)x-(\omega-\delta\omega)t)} + e^{j((k+\delta k)x-(\omega+\delta\omega)t)}\right]$$

soit :

$$\psi(x,t) = A \cdot e^{j(kx-\omega t)} \left[e^{j(\delta k - \delta\omega)} + e^{-j(\delta k - \delta\omega)} \right] = 2A \cdot e^{j(kx-\omega t)} \cdot \cos(\delta kx - \delta\omega t)$$

La densité de probabilité de présence donne :

$$\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = 4A^2 \cos^2(\delta kx - \delta\omega t)$$

CONCLUSION : normalisation toujours impossible !

- .... DONC FORCÉMENT IL FAUT UNE INFINITÉ D'ONDES DE DE BROGLIE (CF CHAPITRE XVII : PLASMAS ET PAQUETS D'ONDE) C'EST À DIRE UN PAQUET D'ONDE À SPECTRE CONTINU :

PROPRIÉTÉ - (IV.2) - 14:

La fontion d'onde d'un système quantique réel c'est à dire **normalisable** *est un paquet d'onde à spectre continu dedensité spectrale* $\underline{g}(k)$ *avec :*

$$\boxed{\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \underline{g}(k) \cdot e^{j(kx-\omega(k)t)} \cdot dk}$$

Plus précisément, on peut écrire ce paquet d'onde comme une $[TF^{-1}]$*, et pour des raisons de «réversibilité» de la TF, on ajoute le facteur* $\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}$ *:*

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

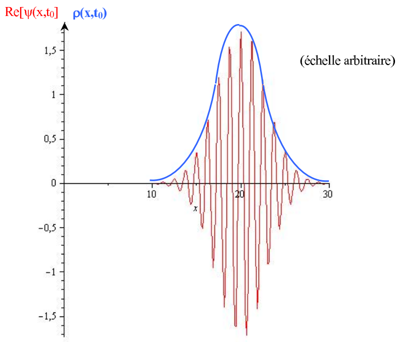

FIGURE XXI.6 – Partie réelle de fonction d'onde et densité de probabilité de présence d'un paquet d'onde

REMARQUE - (IV.2) - 6:

Le lien entre k et ω, nécessaire pour bâtir le paquet d'onde, est la relation de dispersion quantique de la particule libre →cf plus bas.

IV.3 Relation de dispersion de la particule libre - vitesse de groupe du paquet - étalement de $\rho(x,t)$

Définition - (IV.3) - 1:

La relation de dispersion de la particule libre est la relation à satisfaire entre ω et k pour qu'une onde de De Broglie soit solution de l'équation de Schrödinger. (en EM il s'agissait respectivement des OPPH et de l'équation de propagation dans le milieu.

On pose l'ODDB : $\psi(x,t) = A \cdot e^{j(kx-\omega t)}$

que l'on injecte dans l'ES1D : $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = j\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} \quad \Rightarrow \quad \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \hbar\omega$$
soit finalement :

$$\boxed{\omega = \frac{\hbar}{2m}k^2} \qquad \text{relation de dispersion de la particule libre}$$

Par analogie avec l'électromagnétisme, on peut calculer la vitesse de groupe du paquet d'onde c'est à dire la vitesse de déplacement de l'enveloppe de celui-ci, soit :

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

Conclusion : le paquet d'onde se déplace à la vitesse "classique" v de la particule.

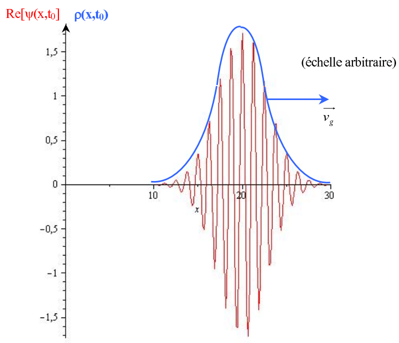

Figure XXI.7 – Déplacement du paquet d'ondes à la vitesse de groupe ≡ vitesse de la particule

Remarque - (IV.3) - 7:

La relation de dispersion est non linéaire; cela entraîne un effet d'étalement du paquet d'onde de la particule au fur et à mesure de son déplacement (cf chapitre XVI électromagnétisme). Ainsi, sa probabilité de présence tend à s'homogénéiser dans l'espace au fur et à mesure de son évolution ⇒ on "perd la trace" de la particule!!!

IV.4 Principe d'incertitude d'Heisenberg

a - Enoncé

En électromagnétisme, nous avons évoqué la relation "temps-fréquence" établissant le lien entre la largeur spectrale en pulsation d'un paquet d'ondes et son étalement temporel (démonstration complète par la "vision du physicien" en fin de chapitre XVI) :

$$\underbrace{\Delta\omega}_{\text{étalement spectral}} \times \underbrace{\Delta t}_{\text{étalement temporel}} \sim 1$$

En différenciant la relation de dispersion : $\omega = \dfrac{\hbar k^2}{2m} \Longrightarrow \Delta\omega = \dfrac{\hbar k}{m}\Delta k$

et en écrivant la largeur temporelle : $\Delta t = \dfrac{\Delta x}{v_g} \overset{p=\hbar k}{=} \dfrac{m\Delta x}{\hbar k}$

la relation d'incertitude précédente peut également s'énoncer entre les grandeurs conjuguées k et x (onde 1D) :

$$\underbrace{\Delta k}_{\text{étalement spectral}} \times \underbrace{\Delta x}_{\text{étalement spatial}} \sim 1$$

En outre, avec la relation du dualité onde-corpuscule de De Broglie $\overrightarrow{k} = \dfrac{\overrightarrow{p}}{\hbar}$, la relation précédente prend la forme de la propriété suivante :

PROPRIÉTÉ - (IV.4) - 15:

Lors de l'étude d'une particule quantique, représentée par un paquet d'onde, les "largeurs" ou incertitudes sur la quantité de mouvement et la position sont liées par la relation d'incertitude d'Heisenberg :

$$\boxed{\underbrace{\Delta p}_{\textit{incertitude sur } p} \times \underbrace{\Delta x}_{\textit{incertitude sur } x} \sim \hbar}$$

REMARQUE - (IV.4) - 8:

Ces relations liant les "largeurs" spectrale et structurelle du paquet d'onde sont assez faciles à comprendre en physique classique ; en revanche, notre sens commun admettant plus facilement le caractère "boule de billard" d'une particule, la non localisation de celle-ci dictée par la relation d'Heisenberg, conséquence du caractère ondulatoire de la matière, est bien plus difficile à admettre.

b - Interprétation physique

<u>HYPOTHÈSE :</u> on suppose une particule libre

Envisageons deux situations différentes :
- si le système quantique préparé dans un état de position assez bien connue :

$$\Delta x \text{ faible} \overset{\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar}{\Longrightarrow} \Delta p \text{ fort} \overset{\overrightarrow{p}=\hbar\overrightarrow{k}}{\Longrightarrow} \boxed{\Delta k \text{ fort}}$$

<u>CONCLUSION :</u>
la particule est décrite par un paquet d'ondes de grande largeur spectrale Δk donc une superposition "riche" d'ODDB.

- si le système quantique préparé dans un état de quantité de mouvement assez bien connu :

$$\Delta p \text{ faible} \stackrel{\vec{p}=\hbar\vec{k}}{\Longrightarrow} \boxed{\Delta k \text{ faible}} \stackrel{\Delta x\cdot\Delta p\sim\hbar}{\Longrightarrow} \Delta x \text{ fort}$$

CONCLUSION :

la particule est décrite par un paquet d'ondes de faible largeur spectrale Δk se rapprochant d'une ODDB correspondant à une seule composante spectrale discrète et **d'étendue spatiale infinie**

REMARQUE - (IV.4) - 9:

Les incertitudes de la relation d'Heisenberg Δp et Δx ne correspondent en rien à une limite technique d'évaluation des grandeurs quantité de mouvement (appelée impulsion) et position, mais véritablement à une limite physique **imposée par la nature ondulatoire**, et donc fatalement **non localisée de la matière**.

IV.5 Courant de probabilité - analogie avec l'EM

Par un bilan succinct d'analogies entre quelques grandeurs de l'électromagnétisme et de mécanique quantique, on peut construire le vecteur **courant de probabilité** ainsi que **l'équation de conservation de probabilité** :

	Electromagnétisme	Mécanique quantique
"Densité" de grandeur	$\rho_e(\vec{r},t)$	$\rho(\vec{r},t) = \|\psi(\vec{r},t)\|^2$
Vecteur "courant"	$\vec{J_e} = \rho_e(\vec{r},t)\cdot\vec{v}(\vec{r},t)$	$\vec{J} = \rho(\vec{r},t)\vec{v} = \|\psi(\vec{r},t)\|^2\vec{v}$ Courant de probabilité
Equation de conservation	$\dfrac{\partial\rho_e(\vec{r},t)}{\partial t} + div\vec{J_e}(\vec{r},t)$	$\dfrac{\partial\rho(\vec{r},t)}{\partial t} + div\vec{J}(\vec{r},t)$ Conservation de probabilité

On retiendra le cas particulier de la particule libre pour laquelle le courant de probabilité vaut :

$$\boxed{\vec{J} = \rho(\vec{r},t)\vec{v} = |\psi(\vec{r},t)|^2\cdot\frac{\hbar}{m}\vec{k}}$$

REMARQUE - (IV.5) - 10:

En électromagnétisme, l'équation locale de conservation de charge signifie simplement que la charge se déplace, mais n'est ni créée ni annihilée. Parallèlement l'équation de continuité en mécanique quantique témoigne de la conservation de la densité de probabilité de présence, et par conséquent de la nécessaire **conservation de la particule** qui se déplace dans l'espace.