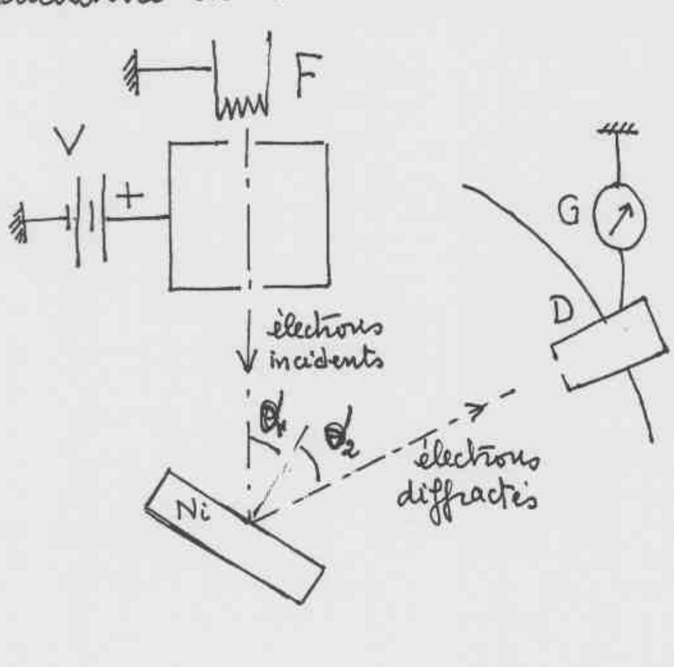
# B Les bases de la physique quantique

La physique est la modélisation du réel. La mécanique quantique a été élaborée pour rendre compte des phénomènes liés aux petites dimensions, aux petites énergies. Dès Planck et Einstein, attribuer une nature double, duale à la lumière, onde et particule (le photon), était proposé. Mais cette dualité onde-corpuscule était-elle une propriété générale donc commune également aux particules massiques? Les expériences décrites ci-après n'étaient pas connues de de Broglie lorsqu'il a dans sa thèse avancé l'hypothèse d'une onde associée à toute particule. La grandeur qui se propage nous apporte une information sur la probabilité de présence et l'équation de Schrödinger nous permet de la connaître en diverses situations. Avec la théorie quantique, on passe dans un monde qui n'est plus déterministe mais probabiliste - le principe d'incertitude d'Heisenberg est là pour nous le confirmer.

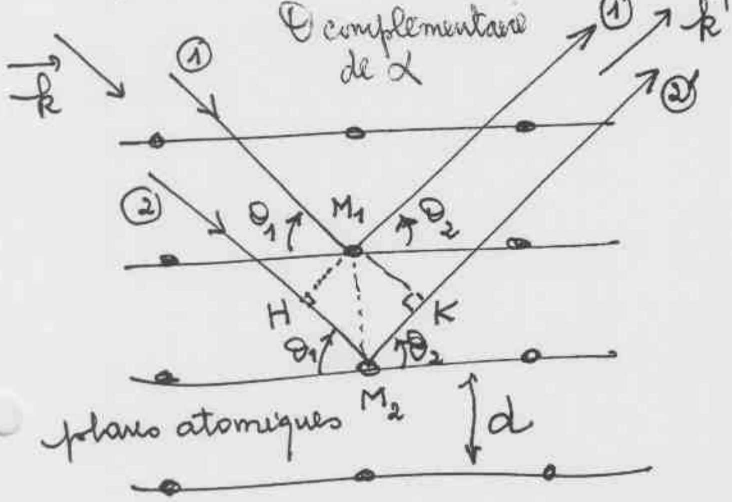
## B 1 Nature ondulatoire des particules matérielles

La nature corpusculaire de l'électron (par exemple) a été établie avant 1900 (J. J. Thomson) et chacun a en mémoire les traces de particules que l'on observe dans les chambres à bulles, aux trajectoires modifiées par des champs magnétiques. L'expérience la plus ancienne mettant en évidence la nature ondulatoire de l'électron est due à Davisson et Germer (1926)


F filament qui produit des électrons accélérés par V et dirigés sur une cible de Nickel. On observe les électrons réfléchi[s] par le Nickel à l'aide du détecteur D et on mesure un courant à l'aide du galvanomètre G

Des réflexions de bonne intensité sont observées seulement si $\theta_1 = \theta_2$ et pour certaines valeurs particulières de $\theta_1$. Ce résultat est semblable à celui obtenu dans la diffraction des rayons X par un cristal (dont Bragg a été le découvreur en 1913). Reproduisons ci-après dans un cas simple (ce qui n'enlève rien à la généralité) la démonstration de la célèbre formule de Bragg (second semestre)




Si l'onde plane incidente s'écrit
$$\Psi_0 \sin(\vec{k}.\vec{r} - \omega t)$$
et l'onde plane réfléchie
$$\Psi_0' \sin(\vec{k}'.\vec{r} - \omega t + \varphi)$$
$\Psi_0$, $\Psi_0'$ étant la grandeur physique propagée ($\vec{E}$ et $\vec{B}$ dans une onde électromagnétique).

On démontre (second semestre) tout d'abord que la composante tangentielle du vecteur d'onde se conserve. Si l'interaction entre l'onde et les atomes est élastique (sans absorption),
$$|\vec{k}| = |\vec{k}'| = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \text{d'où} \quad k\cos\theta_1 = k'\cos\theta_2 \Rightarrow \theta_1 = \theta_2 = \theta$$
(ou $\theta_1 = -\theta_2$ sans déviation)

La grandeur physique de l'onde réfléchie aura une intensité maximale si (1') et (2') correspondent à des ondes en phase - Pour ce faire, il faut que le chemin optique supplémentaire effectué par (2)(2'), par rapport à (1)(1') soit un nombre entier de longueurs d'onde.

$$[HM_2K] \text{ avec } n \text{ indice } \lambda 1 = HM_2 + M_2K = d\cos\left(\frac{\pi}{2} - \theta_1\right) + d\cos\left(\frac{\pi}{2} - \theta_2\right)$$

$$2d\sin\theta = n\lambda$$

les directions de diffraction intenses pour un $\lambda$ imposé, sont définies en donnant à $n$ des valeurs entières 1, 2, 3... limitées par
(>0 ou <0)
$$n \leq \frac{2d}{\lambda}$$

Cette découverte de Davisson et Germer peut être interprétée si on considère que le pinceau d'électrons se comporte comme le pinceau d'une onde de longueur d'onde

$$\lambda = h/p$$

$p$ est la quantité de mouvement d'un électron. Son énergie dans le vide (ou l'air sans champ électrique) est l'énergie cinétique $\frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2}mv^2$ et $p = mv$, par ailleurs $\frac{p^2}{2m} = eV$, $V$ étant la tension d'accélération

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meV}}$$

on trouve pour diverses tensions V, les $\lambda$ suivants :

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| $V$ = | 10 | 100 | 1000 | $10^4$ | volts |
| $\lambda$ = | 0,4 | 0,13 | 0,04 | 0,013 | nm |

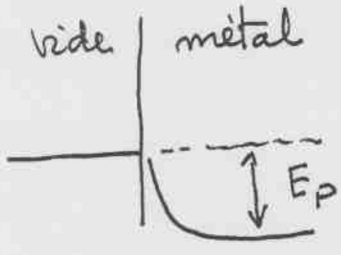
on constate que dès que V atteint 100 V, $\lambda$ est plus petit que la distance entre plans atomiques (qques Å). Donc la diffraction électronique donne des informations sur les structures cristallines comme les rayons X. Mais si ces derniers pénètrent bien la matière, les électrons ne le peuvent pas en général et donnent donc des informations sur les surfaces (par exemple d'oxydes à la surface d'un métal).

Si les particules utilisées ne sont pas chargées, d'autres procédés sont utilisés pour obtenir des pinceaux de particules comme les protons issus des réacteurs. On a, si W est leur énergie

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2MW}}$$

on voit que plus leur masse M est grande, plus $\lambda$ sera petite

<u>Remarque</u> : le $\lambda$ expérimental dans des expériences de diffraction électronique est différent de $\lambda$ théorique précédent car il existe un ~~potentiel~~, une énergie potentielle dans le métal diffractant $E_p$.




dans le vide $E_c = \frac{p^2}{2m}$ $\quad E_p = 0$

dans le métal $E_c = \frac{p'^2}{2m}$ $\quad E_p \neq 0 = -W_0$

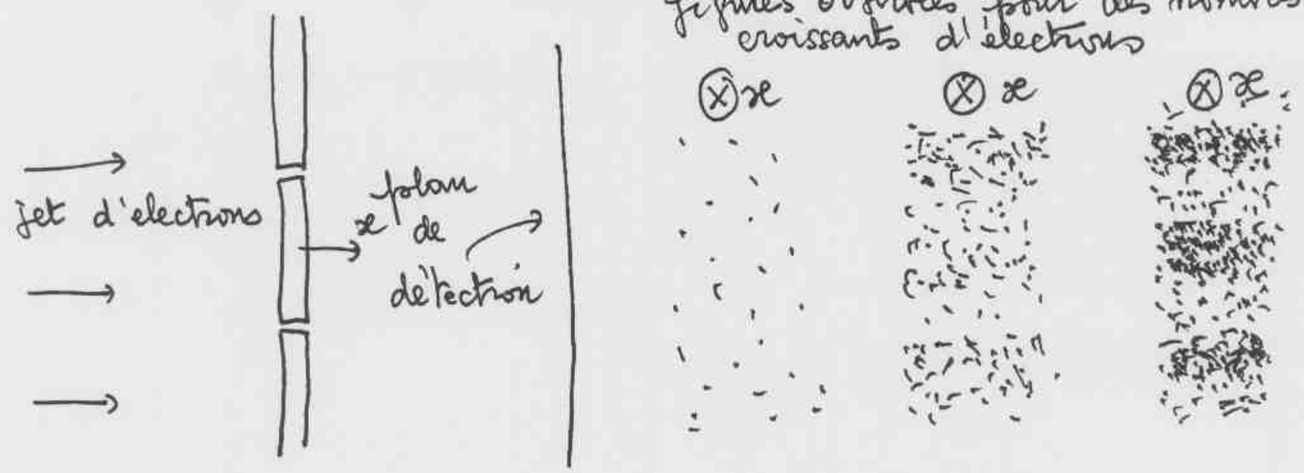
$$\lambda_{vide} = h/\sqrt{2mE_c} = h/p$$

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{p'^2}{2m} - W_0 \qquad p'^2 = p^2 + 2mW_0$$

$$\lambda_{métal} = \frac{h}{p'} = \frac{h}{p\left[1 + \frac{2mW_0}{p^2}\right]^{1/2}} = \frac{\lambda_{vide}}{\left[1 + \frac{2mW_0}{p^2}\right]^{1/2}}$$

ce qui correspond exactement aux résultats expérimentaux.

L'expression de Davisson et Germer a eu une importance historique. Depuis, on sait réaliser avec des jets d'électrons des diffractions et interférences dont les figures sont semblables à celles obtenues avec une onde électromagnétique : lorsque le nombre d'électrons est très faible, les impacts d'électrons semblent aléatoires, mais dès que l'intensité du pinceau croît, dès que le nombre d'électrons augmente, les figures classiques d'interférences apparaissent.




## B2 Onde associée de de Broglie

De Broglie postulat dans sa thèse (1924) que l'on pourrait associer à toute particule ( $\mathbf{p}$ quantité de mouvement, $W$ énergie) une onde représentée par

$$\psi = \psi_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$$

Sans omettre la relation introduite par Planck de quantification de l'énergie

$$W = h\nu = \hbar\omega$$

Un élégant raisonnement sur la nature des grandeurs ($\vec{p}$, $W/c$ d'une part et $\vec{k}$, $\omega$ sont des quadrivecteurs de l'espace-temps) permet de conclure à la correspondance obligée entre $\vec{p}$ et $\vec{k}$ et conduit à

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

Démontrons cela autrement dans le cas non relativiste et dans le cas relativiste

- non relativiste (dans le vide sans énergie potentielle)

$$E_c = \frac{1}{2} m v^2 = \hbar\omega$$

la vitesse de l'énergie, du déplacement des particules $v$, correspond dans la description ondulatoire à la vitesse de groupe (voir cours ondes électromagnétiques) $d\omega/dk$

$$m v\, dv = \hbar\, d\omega = \hbar v\, dk$$

$$m\, dv = \hbar\, dk$$

en intégrant, comme la particule peut aller dans un sens ou son opposé, la constante d'intégration sera nulle, d'où

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

en module $p = \dfrac{h}{2\pi} \cdot \dfrac{2\pi}{\lambda}$

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Rem : la vitesse de phase $V$ sera $\dfrac{\omega}{k} = \dfrac{\hbar\omega}{\hbar k} = \dfrac{E_c}{p} = \dfrac{v}{2}$

. <u>cas relativiste</u>

$$W_{totale} = mc^2 = \hbar\omega$$

$$W^2 = m_0^2c^4 + p^2c^2 = m^2c^4$$

$$p^2 = (m^2 - m_0^2)c^2$$

$$p\,dp = mc^2\,dm \qquad dp = \frac{mc^2}{mv}dm = \frac{c^2}{v}dm = \frac{dW}{v} = \hbar\frac{d\omega}{v}$$

avec $v = \dfrac{d\omega}{dk}$ on a $dp = \hbar\,dk$

donc $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ qui est donc une relation générale

la vitesse de phase $V$ sera

$$V = \frac{\omega}{k}\frac{\hbar}{\hbar} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v}$$

on constate une différence dans la relation $V \leftrightarrow v$ avec le cas classique car l'origine des énergies est différente (La relation de Planck concernait seulement l'énergie cinétique, ici au total de l'énergie)

. <u>Probabilité de présence et onde de de Broglie</u>

la grandeur $\Psi$ introduite dans le raisonnement de de Broglie, n'a pas la dimension des grandeurs physiques habituelles (pression acoustique, champs électrique et magnétique ....). les expériences de diffraction (ou d'interférences) avec des électrons montrent que les électrons sont plus nombreux à certains endroits et absents à d'autres. Si $\Psi$ est l'amplitude de l'onde associée, on définira $\Psi^2$ comme le nombre moyen d'électrons par unité de volume, ou encore

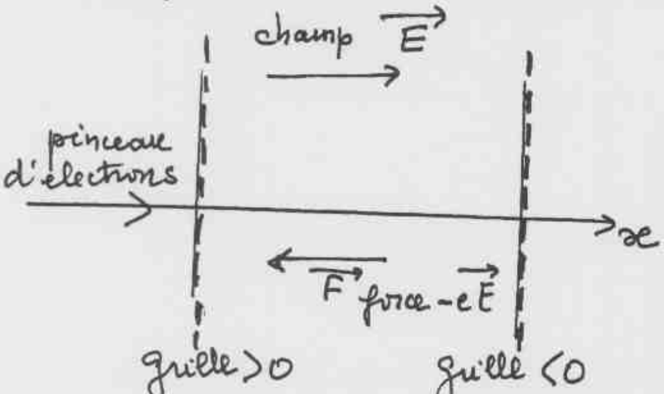
$$\Psi^2\,dx\,dy\,dz$$

est la probabilité qu'un électron soit présent dans le volume $dx\,dy\,dz$ à un instant $t$ déterminé. Donc, par exemple, si un pinceau d'électrons (de particules) tombe perpendiculairement à une cible, le nombre d'électrons qui la frappe par seconde sur une surface $S$ est

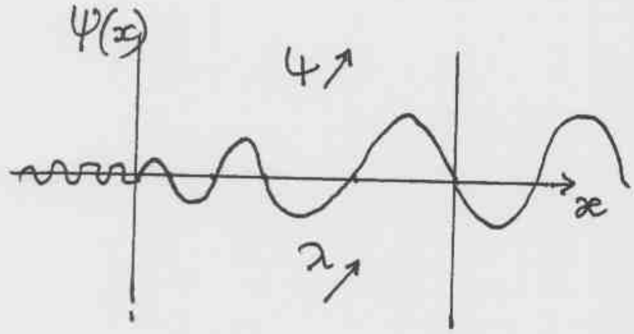
$$\Psi^2 v S$$

Utilisons ce concept dans des situations que l'on rencontre souvent.

→ électrons dans un champ électrique




Soit un pinceau d'électrons qui traverse un espace à travers deux grilles dont les tensions créent un champ $\vec{E}$ et une force $-e\vec{E}$ qui s'oppose au mouvement des électrons. A l'entrée dans la première grille les électrons ont une vitesse $v_0$ et une énergie W, à la sortie l'électron a perdu de sa vitesse devenue $v$




$$v_0 = \left[\frac{2W}{m}\right]^{1/2} , \quad v = \left[\frac{2}{m}(W - eV)\right]^{1/2}$$

on a $\lambda = h/p$

$$\lambda_0 = \frac{h}{[2mW]^{1/2}} , \quad \lambda = \frac{h}{(2m(W-eV))^{1/2}}$$

donc $\lambda$ augmente entre les deux grilles

le nombre d'électrons par unité de volume est $\psi^2$ et le courant électrique, c'est à dire le nombre d'électrons traversant une grille par unité de temps est :

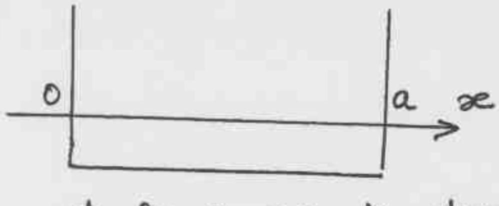
$$S_{\text{surface de la grille}} \times \psi^2 v(x)$$

le courant étant constant et $v$ diminuant avec $x$ entre les deux grilles, $\psi^2$ donc $\psi$ augmentent :

$$\psi \sim (W - eV(x))^{-1/4}$$

le schéma $\psi(x)$ résume la situation

→ particule dans une boite




Nous avons déjà traité ce problème (puits infini) en page 19. Quel traitement ondulatoire :

une onde vers la droite $\psi_1 \sin(k.x - \omega t)$
- une onde vers la gauche $\psi_1 \sin(kx + \omega t + \varphi)$

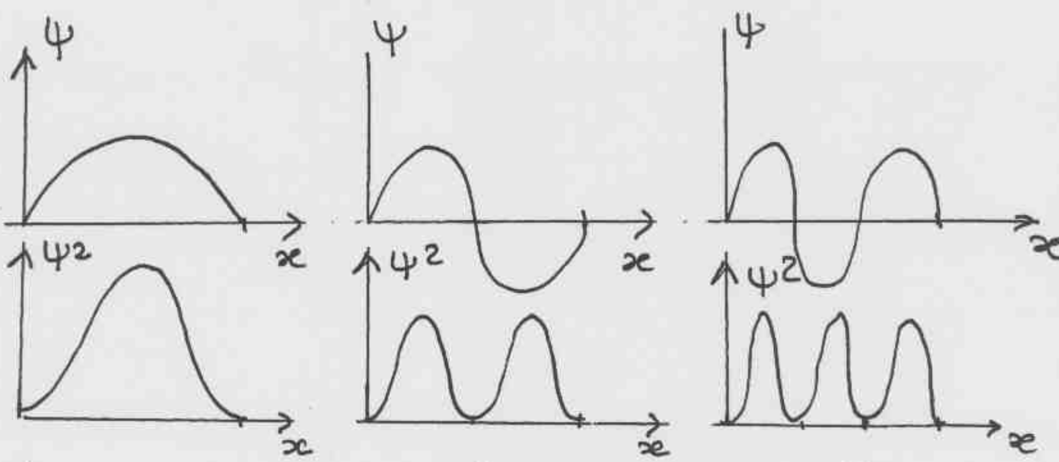
et la somme des deux en respectant des conditions aux limites. Or si on veut éviter des discontinuités de $\psi(x,t)$ aux bords et sachant que $\psi(0,t)$ et $\psi(a,t) = 0$, on trouve

$$\psi(x,t) = \psi_0 \sin \frac{n\pi x}{a} \cos \omega t \qquad \left(\text{car } k = \frac{n\pi}{a}\right)$$

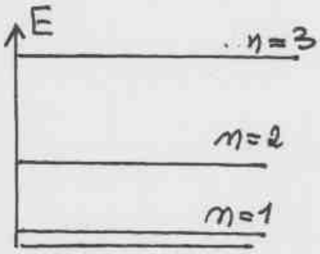
c'est la fonction qui définit l'onde, la fonction d'onde

on a écrit $n\lambda = 2a$ et $\lambda = h/mv$ et l'énergie qui n'est que cinétique vaut

$$E_c = \frac{1}{2} m v^2 = n^2 \frac{h^2}{8a^2 m} \qquad \text{comme en } 19$$




on trace donc les densités de probabilité comme ci-dessus. Une différence notable existe avec le modèle de Bohr-Sommerfeld : n ne peut prendre la valeur zéro, cela n'aurait aucune signification du point de vue de l'onde, d'où le premier niveau d'énergie pour $n = 1$




ce petit modèle très simple permet des estimations d'énergie de base d'un atome ou d'un noyau en prenant pour a les dimensions typiques connues :

atome : $n = 1$ , $a = 2 A^{\circ} \longrightarrow v = 1{,}5 . 10^{6} ms^{-1}$

$E_c = 6 eV$

nucleons dans un noyau

$n = 1$ $M \sim 2000 m$ $\longrightarrow v \sim 10^{7} ms^{-1}$

$a \sim 10^{-14} m$ $E_c \sim 200\,000 eV$

ordres de grandeur pour $E_c$ assez proches de ceux observés

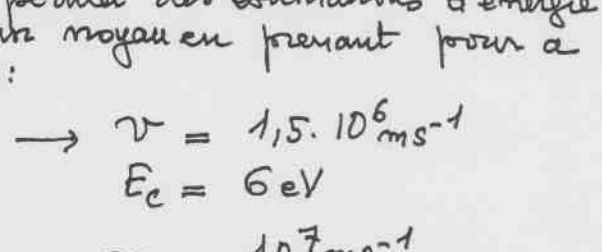
→ ondes stationnaires sur une orbite

Un résultat important, outre la quantification de l'énergie, est la quantification du moment cinétique - Il nous faut un modèle qui fait apparaître un moment cinétique. le plus simple est une onde décrivant un cercle

reprenons

$\Psi = \Psi_0 \sin(\vec{k}\vec{r} \pm \omega t)$

qui correspond à une particule décrivant un cercle donc une onde se



(a) (b)

propageant sur une circonférence dans un sens ou dans le sens opposé. Si on désire que Ψ reprenne la même valeur au même endroit (cas (a)), il faut que (avec $\lambda = h/mv$)

$$n\lambda = 2\pi r$$

le moment cinétique sera $mvr = \frac{h}{\lambda} r$

d'où $mvr = h \cancel{r} \frac{n}{2\pi \cancel{r}} = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$

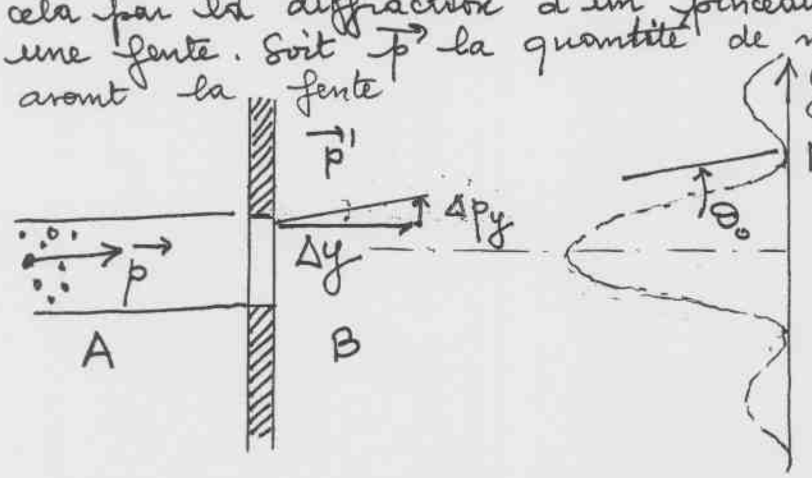
qui est la condition de quantification de Bohr mais ici n peut être égale à zéro

Ce dernier point est important : pour $n = 0$ le moment cinétique et l'énergie sont nuls - Pour $n = 1, 2, 3 \ldots$ la particule peut se mouvoir dans un sens ou dans l'autre sur son orbite, le niveau d'énergie est dit " dégénéré ". Il est possible de lever cette dégénerescence par exemple par l'action d'un champ magnétique (effet Zeeman).

## B3 le principe d'incertitude

la mécanique classique nous a habitué à ce qu'un point matériel puisse être bien défini par sa position et par sa vitesse ou quantité de mouvement : $\vec{r}$, $m\vec{v} = \vec{p}$

- En mécanique quantique la situation est différente. Illustrons cela par la diffraction d'un pinceau d'électrons à travers une fente. Soit $\vec{p}$ la quantité de mouvement de la particule avant la fente




les résultats de l'optique ondulatoire nous donnent la forme de $\psi^2(y)$ :

$$\psi^2 = \psi_0^2 \frac{\sin^2\left(\frac{\pi \Delta y \sin\theta}{\lambda}\right)}{\left(\frac{\pi \Delta y \sin\theta}{\lambda}\right)^2}$$

c'est à dire que, en transposant aux particules, la probabilité de présence d'une très grande part d'entre elles, se produira dans le premier lobe défini par

$$\frac{\pi \Delta y \sin\theta_0}{\lambda} = \pi \qquad \sin\theta_0 = \frac{\lambda}{\Delta y}$$

les électrons (particules) qui arriveront en M auront une quantité de mouvement $\vec{p}\,'$ dont la modification par rapport à $\vec{p}$ est évidente : en A, $p_y = 0$, en B elle vaut $\Delta p_y$

$$\text{et comme } p' = \frac{2\pi}{\lambda}\hbar, \quad \Delta p_y = p' \sin\theta_0 = \frac{2\pi}{\lambda}\sin\theta_0 \hbar$$

$$\text{d'où} \quad \sin\theta_0 = \frac{\lambda}{\Delta y} = \frac{\lambda \Delta p_y}{2\pi\hbar}$$

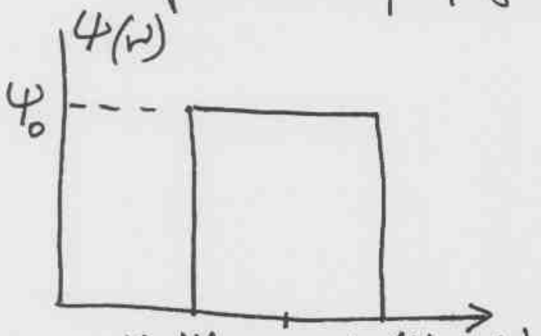
$$\boxed{\Delta p_y \cdot \Delta y \simeq h}$$

c'est le principe d'incertitude qui exprime le fait que plus on tente de définir avec précision la position d'une particule (plus $\Delta y$ diminue), plus sa vitesse, sa quantité de mouvement est indéterminée. A l'inverse si on définit avec précision la vitesse ($\vec{p}$) de particules moins leur position est connue.

il est clair que l'on a de la même façon

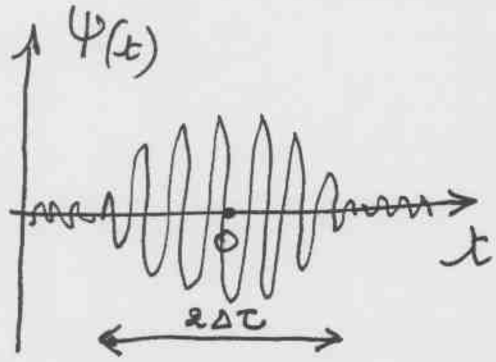
$$\Delta p_x \cdot \Delta x \simeq h$$
$$\Delta p_z \cdot \Delta z \simeq h$$

. Considérons maintenant un jet de particules d'énergie très homogène (une onde quasimonochromatique). On peut la comparer à une onde plane. La fonction d'onde $\Psi$ qui exprime la propagation vers les $x > 0$ peut s'écrire




$$d\Psi = \Psi_0 \, d\nu \, e^{j(2\pi\nu t - kx)}$$

ce qui exprime que dans un intervalle $d\nu$, la fonction $d\Psi$ a une amplitude $\Psi_0 \, d\nu$. On aurait pu écrire $E_0 = h\nu_0$, etc qui correspond à un pinceau de particules à l'énergie assez bien définie $\left(E = h\nu_0 \pm \frac{\Delta\nu}{2}\right)$ si $\Delta\nu$ est petit




que devient $\Psi$ en fonction de $t$ ?

$$\Psi(x,t) = \Psi_0 \int_{\nu_0 - \frac{\Delta\nu}{2}}^{\nu_0 + \frac{\Delta\nu}{2}} e^{-jkx} e^{2\pi j\nu t} \, d\nu$$

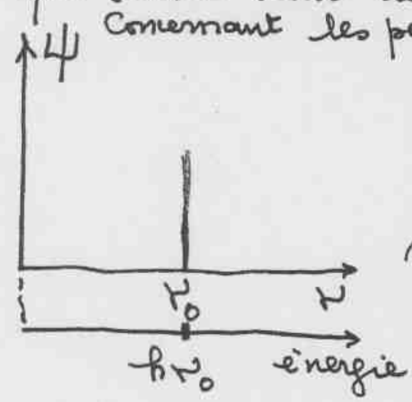
$$\Psi(x,t) = \Psi_0 \, \Delta\nu \, \frac{\sin(\pi\Delta\nu t)}{\pi\Delta\nu t} \, e^{j(2\pi\nu_0 t - kx)}$$

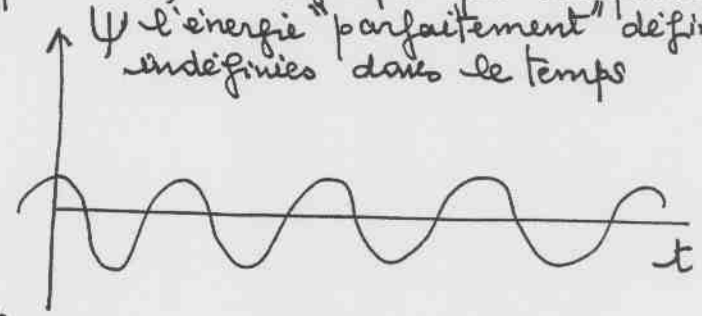
l'amplitude de la fonction est en sinus/x et la plus grande partie de $\Psi$, de $\Psi^2$, donc la grande probabilité de trouver des particules est dans le premier lobe défini par

$$\pi\Delta\nu t = \pi\Delta\nu\Delta t = \pi \quad \text{donc} \quad \Delta\nu \cdot \Delta t \cong 1$$

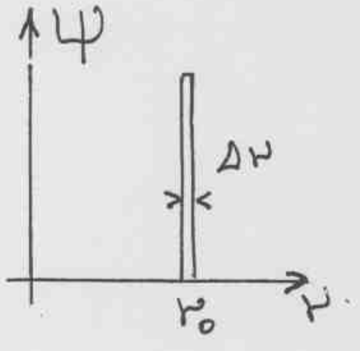
$$\text{ou} \quad h\Delta\nu \cdot \Delta t \cong h \qquad \Delta E_{\text{nergie}} \cdot \Delta t \cong h$$

C'est ce que chacun écrit, pour les ondes lorsque l'on parle d'une onde monochromatique en traçant une sinusoïde qui semble venir de l'infini et de partir vers l'infini.
Concernant les particules, cela signifie que des particules à l'énergie "parfaitement" définie, sont indéfinies dans le temps



les relations d'incertitude sont utiles dans la spectroscopie. Soit par exemple une émission lumineuse qui correspond au changement de niveau d'électrons




on a une raie en $\nu_0$ avec une largeur $\Delta\nu$ (ou en $\lambda_0$ avec une largeur $\Delta\lambda$) - la source émet des photons et cette émission ne peut se produire que pendant le temps $\tau$ (ou $\Delta\tau$) durée de vie du niveau (ou des électrons sur le niveau). On a donc

$$\Delta\nu \, . \, \tau \simeq 1$$

et la largeur de raie nous donne une évaluation de la durée de vie (sauf si elle est masquée par d'autres phénomènes tels l'effet Doppler)

## B4 Fonction d'onde

. Dualité onde - corpuscule

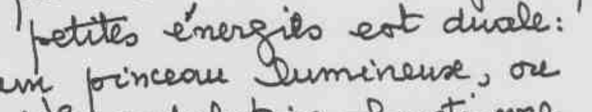
Pour s'approprier la mécanique quantique, il faut tout d'abord se rappeler que la physique propose des modèles, en utilisant le language mathématique, en formulant des concepts, pour rendre compte des réalités expérimentales. le fondement de la physique est le réel, non la théorie, non pas la mathématique qui n'est qu'un moyen, certes indispensable, mais un moyen.

Or la réalité expérimentale lorsque l'on étudie la dynamique de très petits objets et / ou de très petites énergies est duale:

- dans certaines expériences sur un pinceau lumineux, ou sur un jet de particules, le modèle ondulatoire fonctionne avec une belle précision,
- dans d'autres expériences avec un rayonnement de même fréquence et de très faible énergie, ou avec des particules en nombre discernable, c'est le modèle corpusculaire qui rend compte du phénomène.

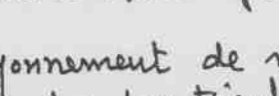
Il faut donc avoir la modestie d'admettre que, par exemple un "même" rayonnement nous apparait comme une onde parfois et comme un jet de particules dans une autre situation. Illustrons cela sur deux exemples en mémorisant ce qui précède et en s'appuyant sur les résultats du principe d'incertitude = la fonction $\Psi(\vec{r}, t)$ que nous allons utiliser doit exprimer la dualité onde-corpuscule

si l'onde est $e^{j(\vec{k}.\vec{r} - \omega t)}$




c'est-à-dire si $\vec{r} = x\vec{i}$

une sinusoïde allant de $-\infty$ à $+\infty$, il est clair que dans ce cas, notre particule si l'on retient ce modèle, pourrait être n'importe où de $-\infty$ à $+\infty$; elle serait totalement indéterminée en position



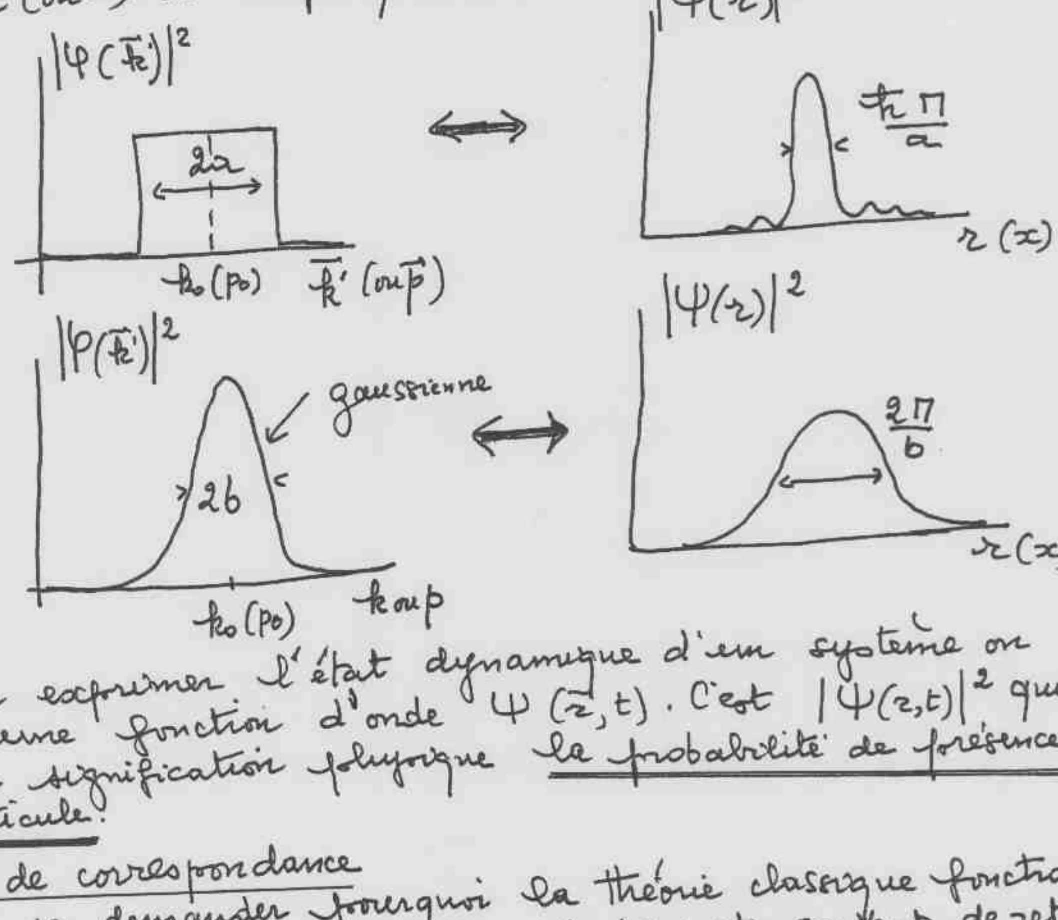
c'est normal, la définition de l'onde fixe $\vec{k}$ et $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ avec $\underset{(\Delta k \text{ donc})}{\Delta \vec{p}} = 0$ donc $\Delta x$ $\infty$.

Si nous voulons indiquer le fait que la particule a une position assez bien déterminée ($\Delta x$ = fini, petit), c'est $\Delta p$ qui sera normal et d'autant plus important que $\Delta x$ est plus petit. On peut réaliser cela en ce qui concerne l'aspect ondulatoire en superposant des ondes de $\vec{p}$, donc $\vec{k}$ voisins - On forme ainsi un paquet d'ondes

$$\Psi(r,t) = \int f(\vec{k}')\, e^{i(\vec{k}'.\vec{r} - \omega' t)}\, dk'$$

avec pour $f(\vec{k}')$ un module A et une phase $\alpha$. On voit que l'on trouve la transformée de Fourier d'une fonction $\varphi(\vec{k}', t)$ donnée par $\Psi(\vec{r}, t)$: Si $\varphi$ est définie non nulle sur des valeurs très localisées de $\vec{k}$ (ou de $\vec{p}$), $\Psi$ ne le sera pas en $\vec{r}$ (ou $x$) et réciproquement.

Exemples




Donc, pour exprimer l'état dynamique d'un système on utilisera une fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$. C'est $|\Psi(r,t)|^2$ qui aura pour signification physique <u>la probabilité de présence de la particule</u>.

- <u>Principe de correspondance</u>

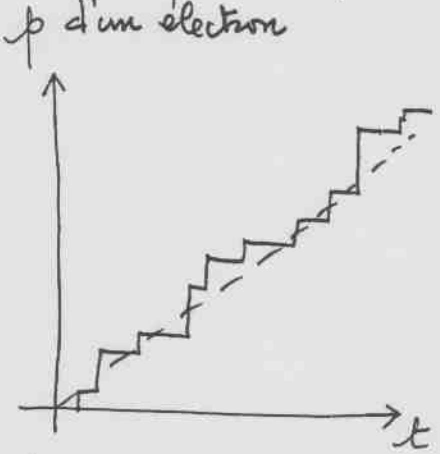
On peut se demander pourquoi la théorie classique fonctionne si bien dans de nombreux cas et permet, souvent, de retrouver les mêmes lois que celles obtenues avec la physique quantique

On peut considérer comme un fait acquis que la théorie classique rend compte des phénomènes à la limite où les discontinuités quantiques peuvent être traitées comme des infiniment petits. Dans tous ces cas limites, les prévisions de la théorie exacte doivent coincider avec celles de la théorie classique. C'est une condition restrictive pour la théorie quantique.

( " la théorie quantique doit tendre asymptotiquement vers la théorie classique à la limite des grands nombres quantiques"

Exemple

Donnons l'exemple d'un électron (dans l'expérience de Compton) qui est soumis à un rayonnement monochromatique et subit des collisions successives avec des photons $h\nu$. On a représenté ci-contre la variation de son impulsion p au cours du temps dans la théorie classique (--- où son énergie et p augmentent continuement) et la théorie quantique où p croit à chaque collision. Si le nombre de collisions est très grand, la courbe quantique et ses discontinuités peut se confondre avec la courbe classique




## Etat dynamique d'une particule et fonction d'onde

la fonction d'onde permet de décrire un état dynamique de la particule et doit donc contenir toutes les informations utiles. Elle peut par exemple, pour l'onde plane associée à une particule dont $\vec{p}$ est bien définie, s'écrire

$$\Psi(x,t) = \Psi_0 \, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$$

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

A un temps t déterminé, on aura donc

$$\Psi(x,t_0) = \Psi_0 \text{ constante } e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

la fonction est bien déterminée par $\vec{k}$ (par $\vec{p}$) et la constante n'a qu'un rôle mathématique puisque la position $\vec{r}$ est indéterminée = changer $\vec{r}$ en $\vec{r}+\vec{R}$ ne change rien à l'état dynamique. Donc l'état dynamique est le même, définit par $\Psi$ ou $\lambda\Psi$; c'est le premier postulat de la mécanique quantique:

> les états dynamiques orbitaux d'un système à une particule sont décrits par des fonctions d'onde complexes, non nulles partout, $\Psi(\vec{r},t)$. Si $\lambda$ est un nombre complexe non nul,
>
> $$\Psi(\vec{r},t) \quad \text{et} \quad \lambda\Psi(\vec{r},t)$$
>
> décrivent le même état dynamique

En général, dans un état dynamique, la position de la particule est mal connue. On définit donc une probabilité de présence dans un élément de volume $d\tau$, avec une fonction de distribution $\rho(\vec{r})$ telle que

$$d\mathcal{P} = \rho(\vec{r})\,d\tau \quad \text{et} \quad \int_{\text{tout l'espace}} \rho(\vec{r})\,d\tau = 1$$

$$\rho(\vec{r}) = \text{cste}\,|\Psi(\vec{r})|^2$$

on classera les états dynamiques en deux catégories : les états liés et non liés

- Dans les <u>états liés</u>, la particule ne peut pas être présente loin d'une certaine région de l'espace où l'on choisit l'origine des $\vec{r}$. Donc $\psi(\vec{r})$ décroît assez vite et sera nul à l'infini. On choisira la constante $\lambda$ de telle sorte que

$$\int_{\text{tt l'espace}} |\psi(\vec{r})|^2 \, d\tau = 1$$

<u>d'où le postulat :</u>

> La probabilité de trouver la particule dans un volume $d\tau$ autour du point origine des $\vec{r}$ est :
> $$d\mathcal{P} = |\psi(\vec{r})|^2 \, d\tau$$

On ne connait rien sur la phase car multiplier par $e^{i\varphi}$ ne change rien = c'est l'arbitraire de phase

- Dans les <u>états non liés</u>, on connait bien $\vec{k}$ (ou $\vec{p}$) et on a le même résultat quel que soit $\vec{r}$. Donc $|\psi|^2$ reste fini à l'infini. On peut
  - soit considérer la particule dans un volume $\Omega$ très grand et écrire
  $$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{[\Omega]^{1/2}} e^{i\vec{k}.\vec{r}}$$
  et quand $\Omega \to \infty$ retrouver une particule libre ($\Omega$ s'élimine)
  - soit considérer que l'on a un très grand nombre de particules indépendantes et écrire le nombre moyen de particules dans le volume $d\tau$
  $$dN = \text{cte}\, |\psi(\vec{r})|^2 \, d\tau$$

Remarque : A la différence de l'électromagnétisme (par exemple) où l'utilisation des complexes correspond à une facilité de calculs, et où seule la partie réelle a une signification physique, ici $\psi$ doit être complexe car $\psi$ et $\text{Réelle}(\psi)$ sont des fonctions d'onde d'états dynamiques différents.
Par exemple dans le cas des états non liés, on désire obtenir $dN/dt$ = cste $|\psi(\vec{r})|^2$ uniforme dans tout l'espace donc $\psi(\vec{r})$ complexe = si on n'en prenait que sa partie réelle on aurait $\psi(\vec{r}) = \cos(\vec{k}.\vec{r})$ et $dN/dt$ serait maximal dans des plans d'onde tels que $\vec{k}.\vec{r} = n\pi$. En outre $dN/dt$ serait oscillant, non homogène et non isotrope.

## <u>Superposition des états dynamiques</u>

le vrai postulat de la mécanique quantique peut s'énoncer :

> Soient deux états dynamiques différents, décrits par les fonctions d'onde $\psi_1$ et $\psi_2$ (non proportionnelles) ; si $\lambda_1$ et $\lambda_2$ sont des nombres complexes non nuls simultanément,
> $$\psi = \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2$$
> est une fonction d'onde qui décrit un état dynamique possible du système

Illustrons cela en nous intéressant à la variable dynamique A (énergie, ou quantité de mouvement...)

$A = a_1$ dans l'état décrit par $\Psi_1$ ($a_1$ est la valeur propre de $\Psi_1$)

$A = a_2$ dans l'état décrit par $\Psi_2$ ($a_2$ est la valeur propre de $\Psi_2$)

Si on multiplie les mesures dans l'état décrit par $\Psi_i$, on trouve toujours $A = a_i$. Que trouve-t-on si on mesure A dans l'état $\Psi = \lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi_2$ ?

on trouvera pour A soit $a_1$, soit $a_2$ et la valeur moyenne de A sera

$$\langle A \rangle = P_1 a_1 + P_2 a_2$$

$P_i$ étant la probabilité de trouver l'état $\Psi_i$. Bien sur $P_1$ et $P_2$ vont dépendre de $\lambda_2/\lambda_1$ complexe. $\langle A \rangle$ est la moyenne quantique, résultat de l'incertitude quantique = A n'est pas bien déterminé dans $\Psi$

## B5 Equation de Schrödinger

On connait les équations différentielles permettant de résoudre des problèmes de dynamique en mécanique classique : ce sont des équations différentielles du second ordre en espace et en temps. On doit à Schrödinger une telle équation pour les $\Psi$, comparable aux $\Sigma \vec{F} = \frac{d}{dt}\vec{p}$ et $\Sigma \mathcal{M}_0(\vec{F}) = \frac{d}{dt}\vec{\sigma}$. La différence fondamentale réside dans le fait que les solutions mathématiques obtenues n'ont pas ~~toutes~~ de signification physique = $|\Psi(\vec{r})|^2$ ne doit pas devenir $\infty$ à l'infini.

soit Energie totale $E_t = \frac{p^2}{2m} + E_p$ énergie potentielle

$$\lambda(\vec{r}) = \frac{h}{p} = \frac{h}{[2m(E_t - E_p)]^{1/2}}$$

et (onde de de Broglie)

$$\text{laplacien} \rightarrow \Delta\Psi(\vec{r},t) - \frac{1}{V^2(\vec{r})}\frac{\partial^2\Psi(\vec{r},t)}{\partial t^2} = 0$$

si on pose $\Psi(\vec{r},t) = \Psi(\vec{r})\, e^{i\omega t}$

$$\Delta\Psi(\vec{r}) + \frac{\omega^2}{V^2(\vec{r})}\Psi(\vec{r}) = 0$$

or $$\frac{\omega^2}{V^2(\vec{r})} = \left(2\pi\nu \cdot \frac{1}{\lambda\nu}\right)^2 = \left(\frac{2\pi}{\lambda(\vec{r})}\right)^2 = \frac{4\pi^2 \cdot 2m(E_t - E_p)}{h^2}$$

d'où

$$\Delta\Psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E_t - E_p(\vec{r})\right)\Psi(\vec{r}) = 0$$

équation de Schrödinger (1926)

qui sera utilisée dans la suite de l'enseignement pour comprendre les états dynamiques de particules à travers des barrières, des puits de potentiel, décrivant des situations physiques à une dimension

**relativité restreinte** (livre : Physique T3 Harris Benson
DeBoeck Université)

- **principe de relativité** : toutes les lois de la physique ont la même forme dans tous les référentiels d'inertie
- **la vitesse de la lumière** dans le vide est la même dans tous les référentiels d'inertie

Sur ces postulats se définissent les phénomènes de dilatation du temps : si $T_0$ est l'intervalle de temps dans un référentiel au repos et $T$ celui enregistré par deux horloges dans un référentiel en mouvement, on a :

$$T = \gamma T_0 \qquad \text{avec} \qquad \gamma = \frac{1}{\left[1 - v^2/c^2\right]^{1/2}}$$

De même, pour les longueurs mesurées dans les deux référentiels (contraction des longueurs)

$$L = \frac{L_0}{\gamma}$$

les principes de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie restent valables mais certaines relations sont modifiées par rapport à celles de la mécanique classique

$$p = mv \qquad \underline{m = \gamma m_0} \quad m_0 \text{ masse au repos}$$

$$E = mc^2$$

cette relation bien connue exprime l'énergie totale d'un système et l'équivalence entre masse et énergie. Ainsi l'énergie cinétique d'une particule est

$$E_c \text{ ou } K = mc^2 - m_0 c^2 = m_0 c^2 (\gamma - 1)$$

avec si $v \ll c$ $\qquad \gamma \# 1 + \frac{1}{2}\frac{v^2}{c^2} + \frac{3}{8}\frac{v^3}{c^3}$ etc

$$\text{donc } E_c \text{ ou } K = m_0 c^2 \left( \frac{1}{2}\frac{v^2}{c^2} + \frac{3}{8}\frac{v^3}{c^3} + \dots \right)$$

qui tend vers $\frac{1}{2} m_0 v^2$ quand $\frac{v}{c}$ tend vers zéro

On trouve aisément la relation entre l'énergie totale et la quantité de mouvement :

$$E^2 = p^2c^2 + m_0^2 c^4$$

qui pour une particule de masse au repos nulle devient

$$E = pc$$

Ces relations seront utiles dans la suite de cet enseignement