Les outils de la Mécanique quantique

Les notions de particules et de trajectoires sont des concepts incontournables de la Physique jusqu'à la naissance de la Mécanique quantique. Il faut bouleverser nos habitudes. On ne peut plus parler de particule, ni d'onde, on parle de *quanton*. Le quanton ou *particule quantique* ou encore *système quantique* constituera la base de notre vocabulaire. Dans certaines situations, la quanton apparaîtra comme une particule alors que dans d'autres sa manifestation serait clairement celle d'une onde.

1 Dualité onde-corpuscule

1.1 Lumière et matière

Nous avons vu précédemment que pour la lumière la manifestation ondulatoire ou corpusculaire a été mise en évidence dans l'effet photoélectrique ou encore dans l'effet COMPTON. Le photon est une particule sans masse qui se déplace à la célérité c dans le vide et dont la quantité de mouvement est reliée à l'énergie par :

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = pc$$

Pour une onde électromagnétique de pulsation ω ou de fréquence $\nu = \omega/2\pi$ et de vecteur d'onde $\vec{k} = k\vec{u}$, les photons associés ont une énergie E et une quantité de mouvement $\vec{p}$ données par les relations dites de PLANCK-EINSTEIN :

$$E = \hbar\omega = h\nu \qquad \text{et} \qquad \vec{p} = \hbar\,\vec{k} = \frac{h}{\lambda}\vec{u}$$

En 1923, LOUIS DE BROGLIE propose d'associer à toute particule matérielle, une onde de longueur d'onde λ_{DB} liée à la quantité de mouvement de la particule selon la relation :

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{p}$$

Cette formule est identique à celle que l'on avait formulé quelques années auparavant pour le photon puisque l'on a $p = h/\lambda$. Attention, toutefois à ne pas aller trop loin car dans le cas d'une particule matérielle non relativiste, on a $p = mv$, si elle est relativiste $p = \gamma mv$ avec $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ alors que pour le photon, on a $p = E/c$ en n'oubliant pas que le photon est de masse nulle.

Pour compléter l'analogie avec le photon, DE BROGLIE propose d'exprimer l'énergie de la particule selon la formule :

$$E = \hbar\,\omega_{DB}$$

Ainsi, on a exactement le même formalisme pour le photon et pour une particule. Il faut toutefois faire très attention au fait que ω_{DB} et λ_{DB} n'ont pas de relation nécessairement simple du type de celle du photon où on peut écrire que $\lambda = hc/E$.

1.2 Retour sur l'atome de Bohr

Nous avons vu que pour justifier des spectres de raies de l'atome d'hydrogène, BOHR avait posé une condition de quantification :

$$L = mrv = n\frac{h}{2\pi}$$

Dans la formule précédente r représente le rayon de la trajectoire circulaire de l'électron autour de l'atome d'hydrogène. À la lumière de la notion de longueur d'onde de DE BROGLIE, on peut réécrire cette condition sous la forme $2\pi rmv = nh$ ou bien encore $2\pi r = nh/p$ si l'on considère l'électron comme non relativiste. On constate donc que le périmètre parcouru par l'électron correspond à un nombre entier de longueur d'onde. Cette condition assure que la phase de l'onde est continue après un tour. On a :

$$2\pi r = n\,\lambda_{DB}$$

1.3 La réalité des ondes de De Broglie

Les objets macroscopiques de masse de l'ordre de 1 kg et de vitesse de l'ordre de $1\,\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$ possèdent une longueur d'onde $\lambda_{DB} \simeq 10^{-34}\,\mathrm{m}$. Il est évident qu'aucune manifestation de leur caractère ondulatoire ne pourra être réalisée. En effet, on sait que, dans le phénomène de diffraction, un effet sensible est obtenu lorsque la longueur d'onde est de l'ordre de la taille de l'objet qui diffracte. La taille d'un nucléon étant de l'ordre de $10^{-15}\,\mathrm{m}$, la longueur d'onde de De Broglie d'un objet macroscopique ne peut se manifester. Par contre, si on considère des particules élémentaires de la matière comme des électrons, la manifestation de leur caractère ondulatoire est possible. Un électron de charge $-e$ soumis à une différence de potentiel U acquiert une énergie cinétique $E_c = eU$ s'il partait du repos. Si la tension U n'est pas trop élevée, il relève de la cinématique classique. Son énergie cinétique est alors $E_c = \frac{1}{2}m_e v^2 = \frac{p^2}{2m_e}$. On en déduit que la longueur d'onde de De Broglie est :

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e E_c}} = \frac{h}{\sqrt{2m_e eU}} \simeq \frac{10^{-9}}{\sqrt{U}} \quad \text{en} \quad \mathrm{m}$$

On constate que si l'on opère avec une tension $U \simeq 100\,\mathrm{V}$ alors la longueur d'onde de De Broglie est de l'ordre de 100 pm. C'est l'ordre de grandeur des dimensions caractéristiques des milieux cristallins. On peut donc espérer provoquer un phénomène de diffraction en envoyant un faisceau d'électrons dans un cristal. Cette expérience a été réalisée, à la figure 1. Les photos montrent des figures de diffraction obtenues avec une même mince feuille d'aluminium, à gauche en diffraction X (zone centrale intense masquée) et à droite en diffraction électronique (zone centrale intense non masquée). Pour une tension de 100 V, l'électron est non-relativiste. Sa vitesse est $v \simeq 6 \times 10^6\,\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}^{-1}$, on a bien $v < c/10$. Le caractère ondulatoire des électrons a été mis à profit pour construire le microscope électronique. il permet de sonder la matière à un niveau de précision que l'on ne peut pas atteindre avec un microscope optique. La longueur d'onde des faisceaux d'électrons étant nettement plus petite que celle de la lumière dans le visible 0,1 nm au lieu de 500 nm, la résolution en est d'autant plus améliorée puisqu'elle est de l'ordre de la longueur d'onde.

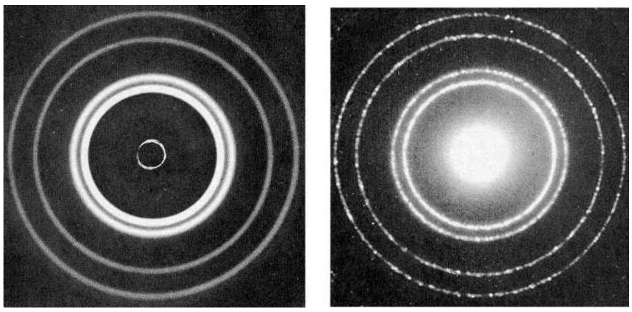

Figure 1 – Diffraction de rayons X et diffraction d'électrons

1.4 Paquet d'ondes

Le comportement ondulatoire incite à penser que le modèle de l'onde plane peut permettre de décrire le quanton (ou particule quantique). On se contente d'une situation unidimensionnelle sur l'axe Ox :

$$s(x,t) = s_0 \exp i(kx - \omega t)$$

En Mécanique quantique, on présente la phase de l'onde plutôt sous la forme $(kx - \omega t)$ que sous la forme $(\omega t - kx)$. Le problème de ce modèle en onde plane est qu'il n'assure aucune localisation dans l'espace, l'amplitude de l'onde est la même $\forall x$. Il est difficile alors de pouvoir envisager que l'onde plane puisse représenter le quanton lorsqu'il se manifeste dans une expérience de Physique sous forme d'une particule. Il est alors indispensable de faire appel à la notion de paquet d'ondes formé par une somme d'ondes planes :

$$s(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} a_0(k) \exp i(kx - \omega t)\,\mathrm{d}k$$

Nous avons vu que dans un paquet d'ondes la vitesse de groupe était la vitesse de propagation de l'information ou de l'énergie. Cette vitesse de groupe restera en Mécanique quantique la vitesse du quanton. En effet, imaginons une particule d'énergie $E = E_c + V$ où V est une énergie potentielle ! Attention, il est de tradition en Mécanique quantique de noter V une énergie potentielle alors qu'il est habituel dans les autres domaines de la Physique de réserver cela à un potentiel. Considérons une particule libre - non soumise à une interaction $V = 0$ - non relativiste. Son énergie cinétique est $E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$. Son énergie est donc :

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2\, k^2}{2m} = \hbar\omega$$

Cette relation est la relation de dispersion associée au paquet qui représente le quanton. On peut l'écrire sous la forme :

La vitesse de phase est :

On voit donc bien ici que toutes les ondes planes du paquet d'ondes ne vont pas se propager à la même vitesse. Il y a bien un phénomène de dispersion avec étalement du paquet d'ondes au cours de sa propagation dans le sens des x croissants, voir le schéma de la figure 2.

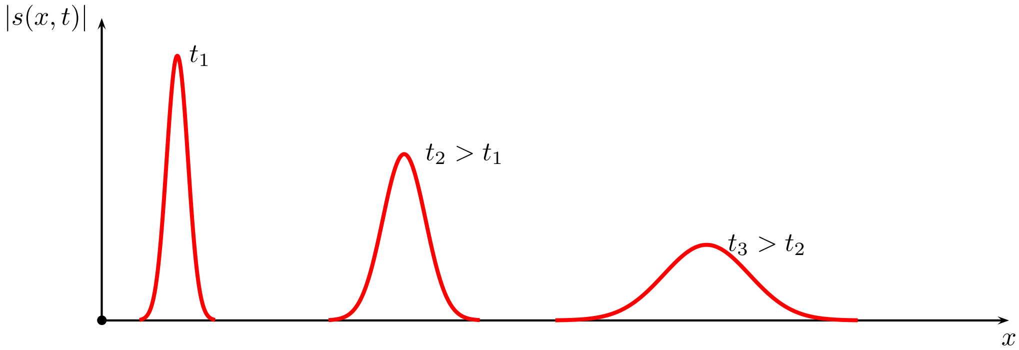

FIGURE 2 – Étalement du paquet d'ondes représentant une particule libre

La vitesse de groupe est :

On identifie bien la vitesse de la particule à la vitesse de groupe. Le modèle du paquet d'ondes semble intéressant mais une expérience d'interférences d'YOUNG a mis en lumière des difficultés d'interprétation de la notion de paquet d'ondes pour décrire la particule quantique.

1.5 Expérience d'Young

Une expérience de type fentes de Young a été réalisée avec une source ponctuelle émettant des corpuscules un à un avec un intervalle de temps entre deux corpuscules successifs plus grand que le temps de transit d'une fente à l'écran. Une vidéo, pour des photons (mais on a le même type d'observation avec la matière), est accessible à l'adresse suivante :

Simulation de l'expérience d'Young
https://www.youtube.com/watch?v=JlsPC2BW_UI
Conférence du physicien Julien Bobroff
https://www.youtube.com/watch?v=A0VwIMbAilE

Chaque particule est envoyée dans l'interféromètre de telle sorte qu'elle s'y trouve seule. Un détecteur repère le lieu d'arrivée de la particule. Si on travaille sur une petite durée, ce qui correspond à un petit nombre de particules envoyées, on note une succession de points d'impact qui ne peut être interprétée qu'avec la notion de corpuscule. Au contraire, si on envoie pendant une longue durée des particules on constate que leur répartition est conforme à celle vue en Optique avec formation de franges rectilignes. . . Il est alors inévitable de décrire les particules par une onde. Les images de la figure 3 montrent 4 images successives de ce que le détecteur observe dans l'expérience des fentes d'Young avec une source envoyant une à une des particules.

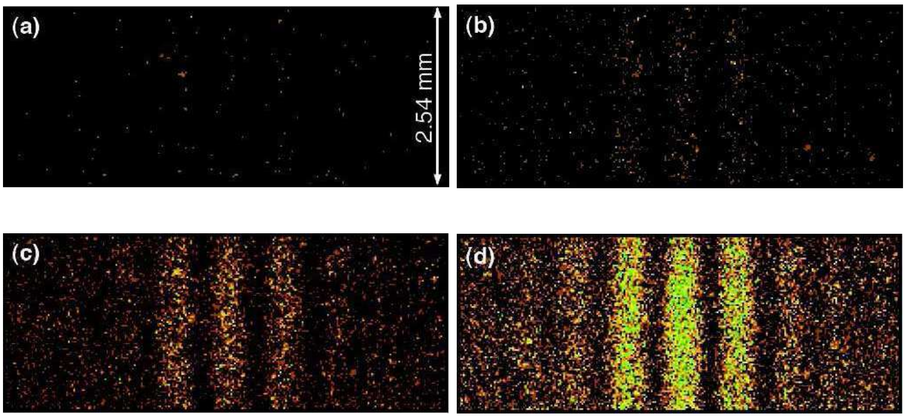

Figure 3 – Interférences d'Young à particules une à une

1.6 Principe de complémentarité de Bohr

On a été amené à constater que les aspects ondulatoires et les aspects corpusculaires sont présents tout en étant inconciliables puisque pour les ondes, on a un objet divisible et d'énergie délocalisée sur l'ensemble de la surface d'onde alors que pour les corpuscules, on a affaire à une entité indivisible et d'énergie localisée dans l'espace. Ce constat a amené Bohr en 1927 à énoncer le principe de complémentarité suivant :

Les aspects corpusculaire et ondulatoire sont deux représentations complémentaires d'une seule et même chose. Tout dépend où, quand et comment on l'observe.

Pour vulgariser la chose, on peut imaginer la métaphore du cylindre : si on éclaire un cylindre sur sa longueur, l'ombre projetée sur un mur donne un rectangle. Au contraire, si on l'éclaire face à sa base, l'ombre donne un disque. On a deux vues différentes d'un même objet : le cylindre, voir la figure 4.

Cet objet bicéphale est le quanton ou la particule quantique ou encore le système quantique dont nous avons parlé. Il faut noter que les deux aspects sont toujours présents dans le quanton. Toutefois, si une expérience révèle l'un des deux aspects du quanton, l'autre ne peut pas être observé en même temps.

FIGURE 4 – Le cylindre : à la fois disque et rectangle. Logo de Chernin Entertainment, compagnie américaine de cinéma et de télévision ayant produit en 2017 *Les figures de l'ombre*, film présentant la vie de trois mathématiciennes de la NASA.

2 Probabilité de présence

2.1 Équation de Schrödinger

En 1926, SCHRÖDINGER propose une équation qui porte aujourd'hui son nom. Cette équation permet de prévoir les évolutions d'une fonction d'onde $\psi(x,t)$ permettant de connaître la dynamique du paquet d'ondes au sens des ondes de DE BROGLIE. La même année, BORN propose de donner un sens à la fonction d'onde $\psi(x,t)$. Au départ, ce sens paru surprenant mais c'est celui que nous utilisons toujours à l'heure actuelle. Cette idée est basée sur le fait que, par exemple, dans l'expérience des interférences d'YOUNG les franges brillantes où l'intensité lumineuse (ou la densité de corpuscule) est élevée correspond à une probabilité élevée d'arrivée des photons ou des particules matérielles alors que les franges sombres sont des zones où cette probabilité est faible. En matière d'onde lumineuse, l'intensité est proportionnelle au carré des champs.

2.2 Interprétation probabiliste de Born

BORN propose donc une interprétation probabiliste de la fonction d'onde $\psi(x,t)$, fonction d'onde a priori complexe. L'état physique d'un quanton est parfaitement précisé par une fonction d'onde complexe $\psi(x,t)$ qui représente une amplitude de probabilité d'état. Ainsi, $|\psi(x,t)|^2$ représente une densité de probabilité d'état.

Dans ces conditions, la probabilité de présence du quanton dans l'intervalle $[x, x+\mathrm{d}x]$ (modèle 1D) est donnée par :

$$\mathrm{d}P = |\psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x$$

Pour une étude complète à 3D, il suffit de raisonner sur l'élément de volume $\mathrm{d}\tau$ situé au niveau d'un point M de l'espace :

$$\mathrm{d}P = |\psi(M,t)|^2\,\mathrm{d}\tau$$

Comme toute loi de probabilité qui se respecte, on doit être certain de trouver le quanton dans tout l'espace disponible. La question n'est pas savoir où, c'est uniquement celle de savoir que la particule quantique est bien présente. La probabilité de la trouver dans l'espace disponible $\mathcal{D}$ est donc de 1. Cet intervalle peut s'étendre de $-\infty$ à $+\infty$ pour x par exemple mais $\mathcal{D}$ n'est pas nécessairement d'extension infinie. Ceci est la condition de normalisation de la fonction d'onde :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x = 1 \qquad \text{ou bien} \qquad \int_{\mathcal{D}} |\psi(M,t)|^2\,\mathrm{d}\tau = 1$$

2.3 Onde plane et paquet d'ondes

On considère un quanton représenté par la fonction d'onde $\psi(x,t)$ de type onde plane de la forme :

$$\psi(x,t) = \psi_0 \exp i(kx - \omega t)$$

Une telle loi pose un problème par rapport à la condition de normalisation. En effet, le quanton possède une probabilité de présence entre les abscisses x et $x + \mathrm{d}x$ indépendante de x :

$$\mathrm{d}P = |\psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x = \psi_0^2 \,\mathrm{d}x$$

Elle est uniforme. Le quanton est équiprobable dans tout l'espace. La fonction d'onde n'est donc pas normalisable puisque tenter d'intégrer une fonction constante sur un domaine infini ne peut que mener à une valeur infinie. Ce modèle de l'onde plane pour le quanton exprime le fait qu'on possède un quanton non localisé. Il n'a pas de sens physique sur un milieu d'extension infinie.

C'est le modèle du paquet d'ondes de densité de probabilité qui va représenter une situation physique acceptable :

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} a_0(k) \exp i(kx - \omega t) \,\mathrm{d}k$$

Cette fonction d'onde est normalisable. Elle décrit un quanton maintenant localisé.

2.4 Moyenne, écart-type et indétermination

Si l'on veut mesurer une grandeur $f(x)$ associé à un quanton, il est indispensable d'effectuer un grand nombre de mesures indépendantes $N \gg 1$ car chaque mesure n'est pas certaine puisque la loi de probabilité affectant le quanton la rend aléatoire. En fait, on effectue une mesure de la valeur moyenne de $f(x)$ que nous allons noter $\langle f \rangle$:

$$\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \,\mathrm{d}P = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, |\psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x$$

La mesure de $f(x)$ ne peut avoir de sens qu'avec la donnée de sa moyenne. Il faut encore savoir comment sont réparties les N valeurs autour de la moyenne. C'est l'écart-type de cet ensemble de N mesures qui va constituer l'information sur la répartition autour de la moyenne. il est défini par :

$$\sigma_f^2 = \langle (f - \langle f \rangle)^2 \rangle$$

L'indétermination sur la grandeur mesurée f est notée Δf. Elle est définie par :

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

Montrons le théorème de Koenig-Huygens :

$$(\Delta f)^2 = \langle f^2 \rangle - (\langle f \rangle)^2$$

Prenons un exemple : on veut déterminer la position x du quanton sur l'axe Ox et son indétermination. Il faudra calculer sa valeur moyenne ainsi que la valeur moyenne du carré de cette position x :

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2\,|\psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x$$

Il ne restera plus qu'à conclure pour afficher l'indétermination de position en écrivant que :

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

3 Indéterminations et inégalité d'Heisenberg

3.1 Diffraction par une fente

On revient ici sur l'étude présentée à titre documentaire de la diffraction à l'infini par une fente de largeur a d'une onde lumineuse de longueur d'onde λ. Après la fente, cette onde lumineuse s'étale principalement dans le pic principal de diffraction comme on peut voir à la figure 5.

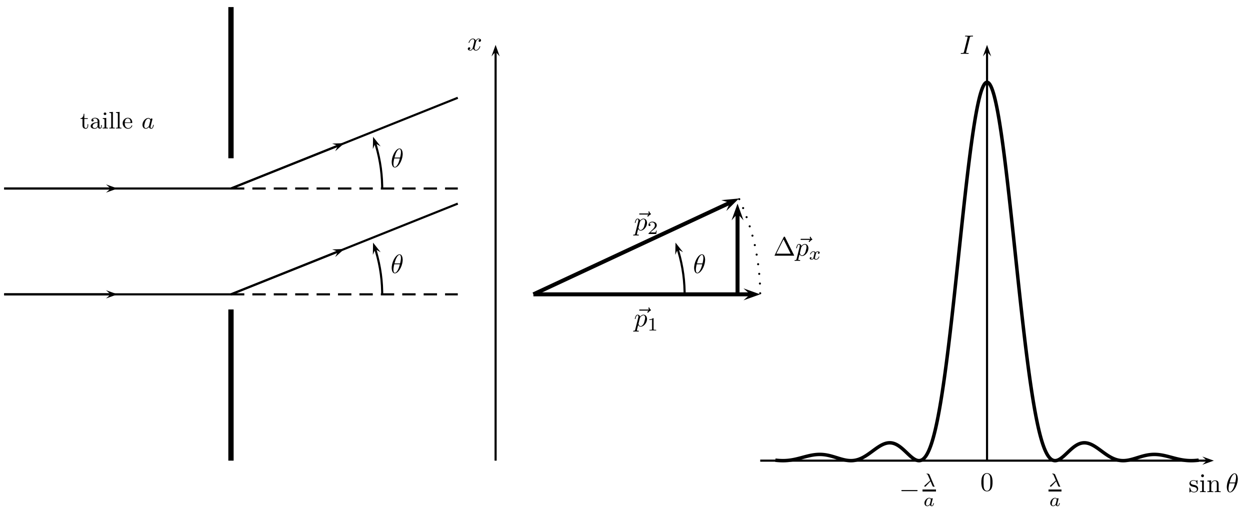

FIGURE 5 – Diffraction de FRAUNHOFER par une fente

L'intensité lumineuse diffractée est donnée par la formule :

$$\mathcal{I} = \mathcal{I}_0 \operatorname{sinc}^2 \frac{\pi a \sin\theta}{\lambda}$$

Dans cette formule, on peut voir que les deux premières annulations de l'intensité lumineuse qui définissent la tache d'Airy sont données par :

$$\sin\theta = \pm\frac{\lambda}{a}$$

L'ouverture angulaire du faisceau est donc telle que $\sin\theta \simeq \frac{\lambda}{a}$. Cela signifie qu'il y a une indétermination de la quantité de mouvement du quanton sur l'axe Ox donnée par :

$$\Delta p_x = p\sin\theta = \frac{h}{\lambda}\sin\theta = \frac{h}{a}$$

Au contraire, lorsqu'on oblige le quanton à être localisé dans un espace $x \in [0, a]$, on réduit son indétermination de position. Cela correspond à une indétermination $\Delta x = a$ sur la position. On peut alors constater que :

$$\Delta x\, \Delta p_x \;=\; h$$

Cette égalité ne doit pas être généralisée, elle a seulement été présentée pour mieux comprendre le principe d'indétermination que nous allons énoncer.

3.2 Relation d'indétermination

La mécanique quantique est une théorie essentiellement probabiliste. Ainsi, la mesure de la position d'un quanton n'a de sens que si on la renouvelle un grand nombre de fois. La valeur mesurée sera alors la moyenne des mesures effectuées. Toutefois, cette moyenne sera connue avec un certain intervalle de confiance lié à l'écart-type. Cet écart-type est à l'origine de l'indétermination de la mesure de la position. Ce que nous venons de voir se reproduit à l'identique pour toute grandeur mesurable associée au quanton. Heisenberg a établi la relation d'indétermination spatiale.

La mesure à un instant donné quelconque de la position x et de l'impulsion p_x d'un quanton (en projection sur un axe (Ox) quelconque) présente des indéterminations fondamentales respectives Δx et Δp_x vérifiant l'inégalité :

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

La relation d'indétermination d'Heisenberg est importante car elle pose concrètement une limite aux interprétations classiques :

- Elle montre que l'on ne peut pas gagner infiniment en certitude sur la position d'un quanton sans perdre en certitude sur son impulsion au même instant (et inversement), ceci étant valable pour tout axe de projection.
- Elle montre que la mesure d'un état quantique (déjà incertain par sa définition à partir de la fonction d'onde de nature probabiliste !) ne donne pas une connaissance parfaite de cet état du point de vue classique !

On généralise à trois dimensions la relation d'indétermination en coordonnées cartésiennes selon $\Delta x\, \Delta p_x \;\geq\; \hbar/2$, $\Delta y\, \Delta p_y \;\geq\; \hbar/2$ et $\Delta z\, \Delta p_z \;\geq\; \hbar/2$.

3.3 Conséquences de l'indétermination

3.3.1 Énergie minimale de confinement

Un quanton matériel confiné ne peut qu'admettre une énergie cinétique minimale non nulle appelée énergie minimale de confinement.

3.3.2 Énergie minimale de l'oscillateur harmonique quantique

La plus basse énergie possible pour un oscillateur matériel harmonique classique est nulle (en prenant pour référence d'énergie potentielle la position d'équilibre) tandis que celle du cas quantique admet une valeur minimale strictement positive.

4 L'équation de Schrödinger

4.1 Première approche

Comme nous l'avons déjà vu, toute particule matérielle peut être considérée comme une onde dont la longueur d'onde est liée à sa quantité de mouvement. En restant dans le cadre de la Mécanique classique, on a :

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

Si nous reprenons la condition de quantification de Bohr sur le moment cinétique, nous avons $mrv = n\frac{h}{2\pi}$. Cette équation a encore été écrite $2\pi r = n\frac{h}{mv}$. Nous sommes donc amenés à écrire que $2\pi r = n\lambda$. Cette situation est à rapprocher de la condition de quantification des ondes stationnaires dans le domaine classique comme celle des ondes le long de la corde.

Si l'on adopte le concept d'onde pour représenter une particule quantique, on utilise la fonction d'onde. Imaginons qu'elle obéisse à l'équation de D'Alembert avec une célérité c. Nous avons donc :

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}$$

Nous avons vu qu'en situation stationnaire, les solutions sont de forme sinusoïdale. Si ω est la pulsation de l'onde, nous avons nécessairement $\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\omega^2\psi$. L'onde associée à l'électron obéit à l'équation différentielle :

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\omega^2}{c^2}\,\psi = 0$$

Or, dans une situation de D'Alembert, la relation de dispersion est de la forme $k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$ avec $k = 2\pi/\lambda$. L'équation différentielle précédente devient alors :

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2}\,\psi = 0 \qquad \text{ou} \qquad \Delta\,\psi + k^2\,\psi = 0$$

Nous savons par les relations de Planck-Einstein que $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ et par conséquent que $k^2 = \frac{\vec{p}^{\,2}}{\hbar^2}$. L'équation différentielle précédente devient : $\Delta\psi + \frac{\vec{p}^{\,2}}{\hbar^2}\,\psi = 0$. Lorsque l'on étudie un quanton non relativiste d'énergie mécanique $E = E_c + V$ où V est l'énergie potentielle et l'énergie cinétique $E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}$, on peut donc écrire que $\vec{p}^{\,2} = 2m(E-V)$. Nous pouvons écrire l'équation suivante :

$$\Delta\,\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\,(E-V)\;\psi = 0$$

Cette équation est importante en Mécanique quantique puisqu'il s'agit de la version stationnaire de l'équation de Schrödinger qui est, en quelque sorte, l'équation fondamentale de la Mécanique quantique. Il est plus habituel d'écrire en Mécanique quantique l'équation de Schrödinger 1D sous la forme :

$$E\,\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\,\psi$$

4.2 Dynamique de la fonction d'onde

Nous considérons l'onde $\psi(x,t)$ associée à un quanton non localisé de quantité de mouvement $\vec{p} = p\vec{e}_x$ et d'énergie E. Ce quanton est donc bien représenté par l'onde plane :

$$\psi(x,t) = \psi_0\,\exp i(kx-\omega t)$$

Or, nous savons que $p = \hbar\,k$ et que $E = \hbar\,\omega$. On utilise ces deux formes dans l'équation précédente et on obtient :

$$\psi(x,t) = \psi_0\,\exp i\frac{(px-Et)}{\hbar}$$

Sur le plan opérationnel, on observe que $\frac{\partial\psi}{\partial t} = -i\frac{E}{\hbar}\,\psi$ et que $\frac{\partial\psi}{\partial x} = i\frac{p}{\hbar}\psi$. On peut donc voir p et E comme des opérateurs tels que :

$$E \times (\ ) = i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial t} \times (\ ) \qquad \text{et} \qquad p \times (\ ) = -i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial x} \times (\ )$$

On considère un quanton non localisé et non relativiste soumis à une énergie potentielle V. Son énergie $E = E_c + V$ avec $E_c = \dfrac{p^2}{2m}$. On en déduit que :

$$E\,\psi = \frac{p^2}{2m}\,\psi + V\,\psi$$

Cette équation fait apparaître l'opérateur p^2 qui compte tenu de la forme de l'opérateur p correspond à une dérivée seconde. On a donc $p^2 \times (\ ) = -\hbar^2 \dfrac{\partial^2}{\partial x^2} \times (\ )$. Cela permet d'obtenir l'équation suivante :

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

Cette forme est l'équation de SCHRÖDINGER unidimensionnelle.

4.3 Équation de Schrödinger

On généralise l'équation précédente à trois dimensions pour un quanton associé à un point M de l'espace à une date t en utilisant le laplacien scalaire :

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

Dorénavant, cette équation sera considérée comme un postulat, sa connaissance n'est pas exigible. Normalement, elle sera rappelée. La fonction d'onde intervenant dans l'équation de SCHRÖDINGER est nécessairement continue, univoque et bornée dans l'espace accessible. En effet, on doit pouvoir associer à tout point de l'espace une densité de probabilité de présence continue et finie.

L'équation de SCHRÖDINGER est une forme d'équation de conservation de l'énergie, chaque opérateur qui y intervient est respectivement associé à l'énergie E, à l'énergie cinétique E_c et à l'énergie potentielle V.

4.4 Linéarité

L'équation de SCHRÖDINGER est une équation différentielle linéaire. Par conséquent, si on possède deux solutions ψ_1 et ψ_2 alors la combinaison linéaire $\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2$ est encore solution. Si l'on revient à l'expérience des trous d'YOUNG à un seul quanton envoyé à la fois dans le dispositif, on peut dire que l'état quantique est une fonction d'onde somme des deux fonctions d'ondes correspondant au quanton passant par le haut ψ_1 et l'autre correspondant à celui passant par le bas ψ_2. On a donc :

$$\psi = \psi_1 + \psi_2$$

La probabilité d'observer le quanton en un point M de l'écran est proportionnelle au carré du module de ψ, à savoir à $|\psi(M)|^2 = \psi\,\psi^*$. On a donc :

$$|\psi(M)|^2 = |\psi_1(M)|^2 + |\psi_2(M)|^2 + (\psi_1(M)\psi_2^*(M) + \psi_1^*(M)\psi_2(M))$$

Dans cette expression, $|\psi_1(M)|^2$ correspond au quanton passant par la fente du haut, $|\psi_2(M)|^2$ au quanton passant par la fente du bas. Le troisième terme est le terme interférentiel qui n'apparait que lorsque les deux fentes sont présentes. C'est celui qui justifie les observations sur des temps longs dans le cas de l'expérience d'YOUNG à quanton unique comme on l'a vu à la figure 3.

4.5 États stationnaires

On appelle état stationnaire l'état quantique caractérisé par une fonction d'onde pouvant s'écrire sous forme à variables d'espace et de temps séparées : $\psi(x,t) = \varphi(x)\,g(t)$ où $g(t)$ est une fonction complexe et $\varphi(x)$ une fonction d'onde spatiale.

$$\boxed{\text{Le potentiel V = V(x) ne dépend pas du temps } t}$$

Une solution stationnaire n'est possible que dans le cas où le potentiel $V(x)$ est uniquement une fonction de x et pas une fonction du temps t. L'équation de Schrödinger est :

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

Le théorème des états stationnaires est fondamental en Mécanique quantique. Sa démonstration est hors-programme. Son énoncé est le suivant :

Les états stationnaires de fonctions d'ondes linéairement indépendantes entre elles et relatifs à une équation de Schrödinger pour une énergie potentielle indépendante du temps constituent une base des fonctions d'onde $\psi(x,t)$ solutions de cette dernière. Autrement dit, la solution générale $\psi(x,t)$ est une combinaison linéaire des états stationnaires $\psi_{es}(x,t)$ indépendants entre eux.

Comme nous l'avons démontré, on a $\psi_{es}(x,t) = \varphi(x)\, \exp -i\dfrac{E}{\hbar}t$. On constate facilement que $|\psi_{es}(x,t)|^2 = |\varphi(x)|^2$. Ce constat nous fait voir que la densité de probabilité de présence d'un état stationnaire est indépendante du temps.

La fonction d'onde spatiale $\varphi(x)$ vérifie l'équation de Schrödinger indépendante du temps que l'on peut écrire :

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\,[V(x) - E]\,\varphi(x)$$

4.6 Questions de continuité...

Nous allons étudié l'évolution de quantons dans des potentiels $V(x)$ modélisés par des fonctions simples - assez souvent constantes - qui peuvent présenter des discontinuités mais aussi des valeurs infinies. La fonction d'onde sera étudiée dans les différents domaines de potentiels mais ensuite, il faudra gérer le raccord des fonctions différentes fonctions d'ondes qui auront été établies.

La fonction d'onde spatiale $\varphi(x)$ est nécessairement continue et bornée car il est inconcevable que la densité de probabilité de présence $|\varphi(x)|^2$ ne soit pas bornée et continue. Une discontinuité dans la densité de probabilité n'aurait pas de sens physique. Une discontinuité de la phase serait acceptable mais en fait des propriétés mathématiques assurent la continuité de $\varphi(x)$ que nous admettrons.

De plus, le second membre de l'équation différentielle précédente est nécessairement une fonction continue sauf dans le cas où l'énergie potentielle présente une singularité comme une discontinuité infinie. Nous allons réfléchir aux deux cas que nous venons d'évoquer.

Commençons par supposer que le potentiel $V(x)$ présente des discontinuités mais qu'il ne diverge pas. $\dfrac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2}$ est une fonction qui présente des discontinuités finies puisque $\dfrac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2} = \dfrac{2m}{\hbar^2}\,[V(x) - E]\,\varphi(x)$. Par conséquent, en intégrant $\dfrac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2}$, on obtient $\dfrac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}$ qui sera donc continue.

Par la suite, on écrira très systématiquement les conditions de continuité de $\varphi(x)$ et de $\dfrac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}$ à l'exception du cas où l'énergie potentielle $V(x)$ est un mur infini où il ne peut y avoir de continuité de $\dfrac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}$. En fait, le problème ne se posera pas car il n'est pas acceptable pour un quanton d'avoir une probabilité de présence à un abscisse x de potentiel $V(x) \to \infty$. À tous les endroits où le potentiel $V(x)$, va diverger la densité de probabilité de présence est nulle : $\varphi(x_{V(x)\to\infty}) = 0$.

4.7 Densité de courant de probabilité

On a vu en Électromagnétisme que la densité de courant électrique était définie par $\vec{j} = \rho\,\vec{v}$ où ρ en $\mathrm{C}\cdot\mathrm{m}^{-3}$ est la charge volumique, $\vec{v}$ la vitesse des porteurs de charges. On peut, pour un quanton non localisé non relativiste et donc de quantité de mouvement $\vec{p}$ parfaitement connue, définir par analogie une densité de courant de probabilité en se basant sur la vitesse du quanton et sur la densité de probabilité de présence. Le tableau des analogies est :

Cas classique en électricité	Cas en électromagnétisme	Cas quantique
Vitesse du porteur $\vec{v}$	Vitesse l'énergie $\vec{v}_{\text{groupe}}$	Vitesse du quanton $\dfrac{\vec{p}}{m} = \dfrac{\hbar\,\vec{k}}{m}$
Charge volumique ρ	Énergie volumique $u_{em} = \dfrac{1}{2}\varepsilon_0\vec{E}^2 + \dfrac{\vec{B}^2}{2\mu_0}$	Densité de probabilité $\lvert\psi\rvert^2$
Densité volumique de courant $\vec{j} = \rho\,\vec{v}$	Puissance surfacique $\vec{j}_{ray} = \vec{\Pi} = u_{em}\vec{v}_{\text{groupe}}$	Densité de courant de probabilité $\vec{J} = \lvert\psi\rvert^2\,\dfrac{\vec{p}}{m}$

Pour une fonction d'onde stationnaire $\psi_{es}(x,t) = \varphi(x)\,\exp -i\dfrac{E}{\hbar}t$, on aura $\vec{J}_{es} = |\psi|^2\,\dfrac{\vec{p}}{m} = |\varphi(x)|^2\,\dfrac{\vec{p}}{m}$. L'expression de la densité de courant de probabilité vue dans le cadre du programme est un cas particulier de la définition plus générale suivante qui est, elle, hors programme :

$$\vec{J} = \vec{e}_x\,\frac{i\,\hbar}{2m}\,\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

5 Critère quantique

Ce critère ne figure pas au programme. Il permet de déterminer si l'on peut se contenter d'étudier un problème physique par les lois de la Physique classique ou bien s'il est indispensable de recourir à la Mécanique quantique. Ce critère fait intervenir une grandeur physique particulière appelée *action*. Cette notion est centrale en Physique car les lois fondamentales de la Physique découlent d'un principe général appelé *principe de moindre action*.

Une action est une grandeur physique dont la dimension est le produit d'une énergie par un temps. Dans le système des unités légales, elle sera représentée par des $\mathrm{J \cdot s}$.

Cette unité ($\mathrm{J \cdot s}$) est déjà très présente dans ce que nous venons d'étudier en Mécanique quantique puisque c'est l'unité de h ou de $\hbar \simeq 10^{-34}\,\mathrm{J \cdot s}$. Une énergie, par exemple l'énergie cinétique est le produit d'une masse par une vitesse au carré $E_c = \frac{1}{2}mv^2$. Si on la multiplie par une durée Δt, on a alors une forme en $mv \times v\Delta t$. On peut encore voir l'action comme le produit d'une quantité de mouvement mv par une longueur $v\Delta t$. Un tel constat nous fait immanquablement penser à un moment cinétique puisque l'on a pour une particule $\vec{L} = \overrightarrow{OM} \wedge m\vec{v}$. Ceci confirme ce que nous avons déjà vu à savoir que pour des particules élémentaires, il n'est pas étonnant que leur moment cinétique s'exprime proportionnellement à $\hbar$. L'action est donc :

$$\text{Action} = \text{Énergie} \times \text{Temps}$$
$$\text{Action} = \text{Quantité de mouvement} \times \text{Distance}$$

$$\text{Critère classique : Action} \gg \hbar$$
$$\text{Critère quantique : Action non grande devant } \hbar$$