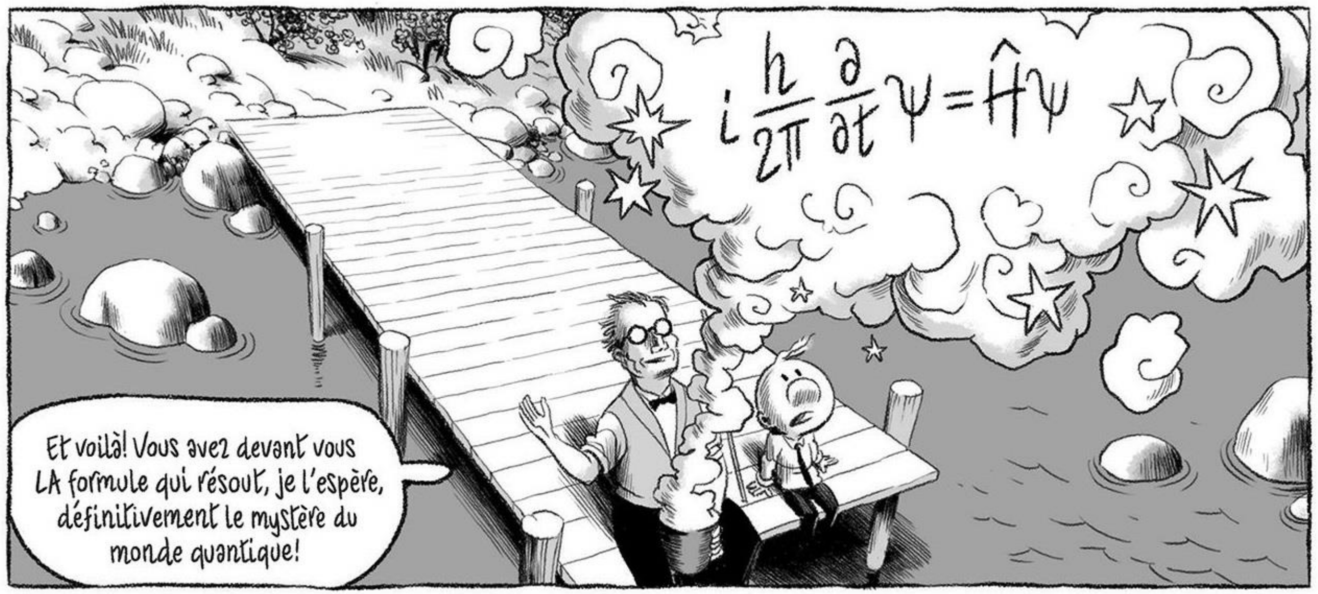
Chapitre IV

Probabilité, fonction d'onde et équation de Schrödinger



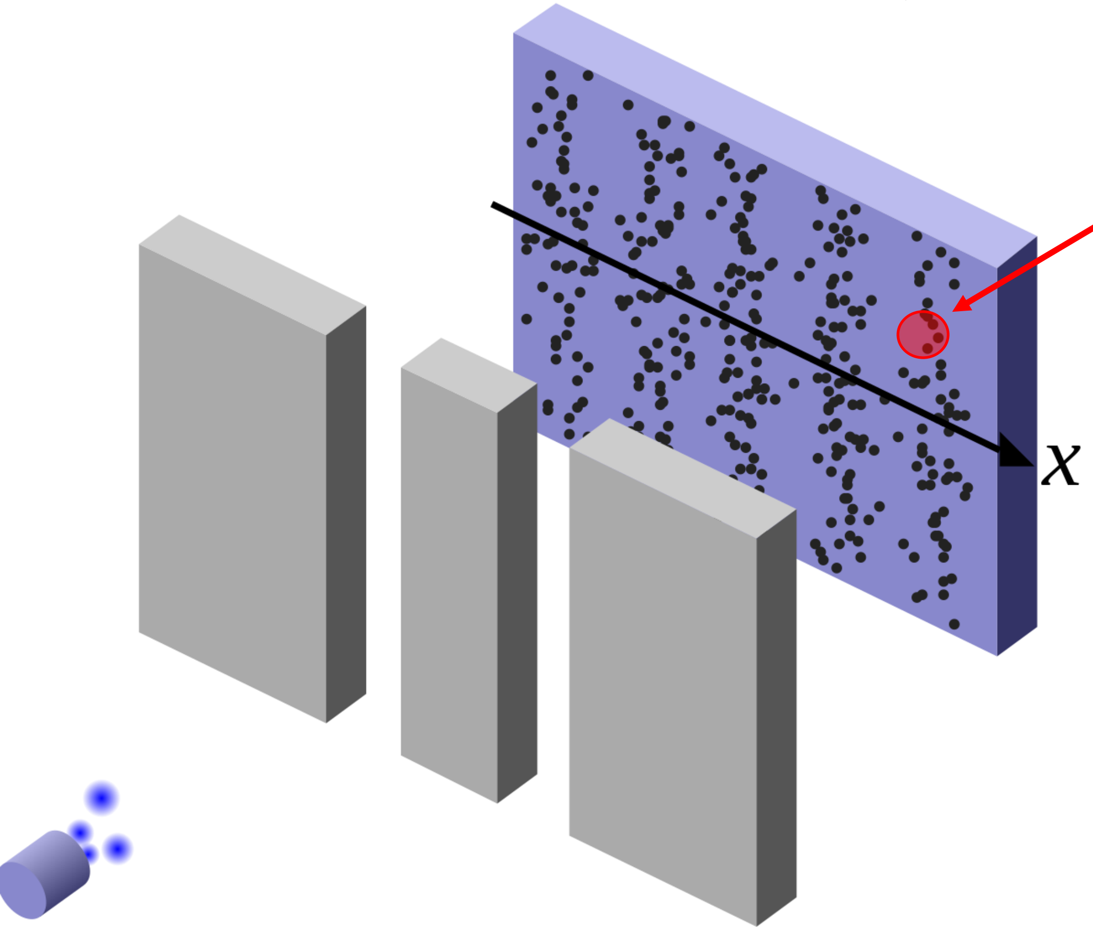
Extrait de la BD « Le mystère du monde quantique », de Damour et Burniat (2016)

Mécanique Quantique
2021-2022 – Semestre 5 – JUNIA ISEN Lille

David Mele
david.mele@junia.com

IV.1 Densité de probabilité classique

La densité d'impact sur la plaque photo est proportionnelle à la **densité de probabilité** $\boldsymbol{p(\vec{r})}$de trouver la particule à la position $\boldsymbol{\vec{r}}$



La probabilité $dP(\vec{r})$ la particule dans un petit volume $d\vec{r}$ est :

$$dP(\vec{r}) = p(\vec{r})d\vec{r}$$

Ou selon une seule coordonnée x :

$$dP(x) = p(x)dx$$

Et s'étend à toute variable continue comme par exemple la vitesse :

$$dP(\boldsymbol{v}) = p(\boldsymbol{v})d\boldsymbol{v}$$

☹ Mais l'évolution de ces densités de probabilités au cours du temps (équations de Newton connaissant les densités à t=0) ne donne pas de très bons résultats dans le domaine microscopique.

IV.2 Fonction d'onde

Pour décrire la physique à l'échelle des particules, il faut introduire une nouvelle fonction de position, appelée **fonction d'onde noté $\Psi(\vec{r}, t)$** tel que:

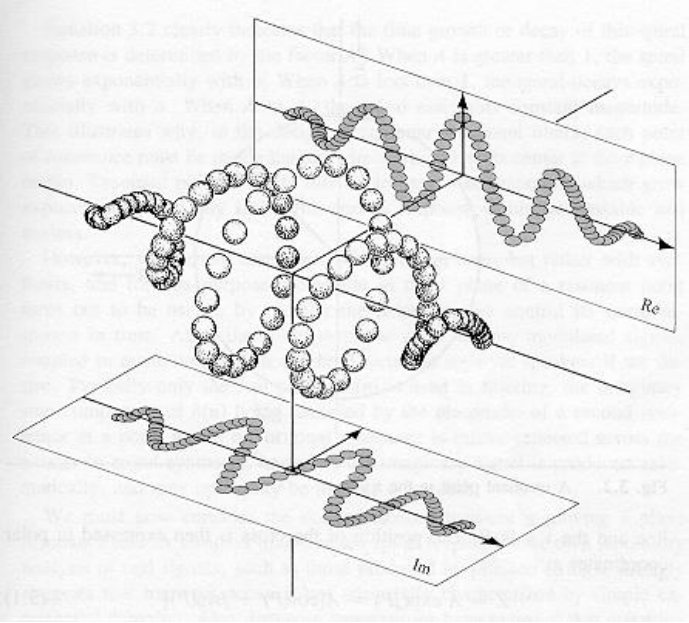
Postulat 1:

Toute particule matérielle peut être décrite par une **fonction complexe**

$$\boldsymbol{\Psi(\vec{r}, t) = f(t)\, \psi(\vec{r})}$$

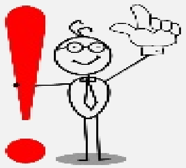
(voir démonstration IV.3c).

avec $\psi(\vec{r}) = \sqrt{p(\vec{r})}\exp(i\varphi\vec{r})$



Toutes les informations concernant la particule à l'instant t et la position $\vec{r}$ sont contenues dans cette fonction $\Psi(\vec{r}, t)$.

Voir TD 3



Attention à ne pas confondre

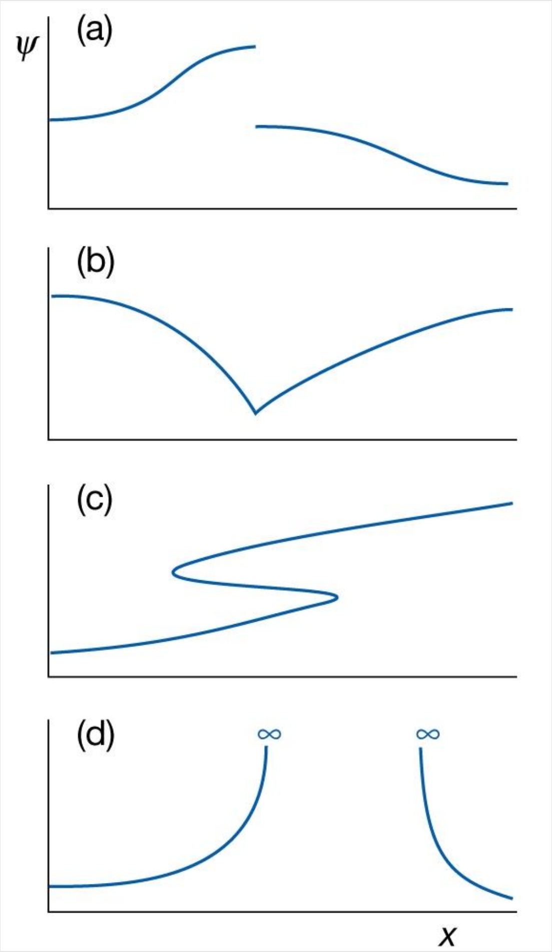
$\boldsymbol{\Psi}$ ([psi] $majuscule$) qui représente la fonction d'onde complexe spatio-temporelle, fonction de $\boldsymbol{\vec{r}}$ $\boldsymbol{et\ t}$ dépendante du temps

$\boldsymbol{\psi}$ ([psi] $minuscule$) qui représente la fonction d'onde complexe spatiale, fonction de $\boldsymbol{\vec{r}}$ indépendante du temps t

$\boldsymbol{\varphi}$ ([phi] $minuscule$) qui représente la phase de la fonction $\psi(\vec{r})$

IV.2 Fonction d'onde

Pour décrire la physique à l'échelle des particules, il faut introduire une nouvelle fonction de position, appelée **fonction d'onde noté $\Psi(\vec{r}, t)$** tel que:



Ψ doit être:

continue

Pente continue

(Sauf si V=∞)

univoque

finie

(dans une région finie)

Quel est le sens de Ψ ?

- La fonction d'onde de Schrödinger est une nouvelle sorte d'onde, une onde de matière
- Ψ est un champ scalaire complexe (partie réelle et imaginaire et Ψ^* est son conjugué complexe).
- dont le carré $|\Psi(\vec{r}, t)|^2\, dV$ est probabilité que la particule occupe le volume dV.
- Ψ doit être une fonction de carré sommable

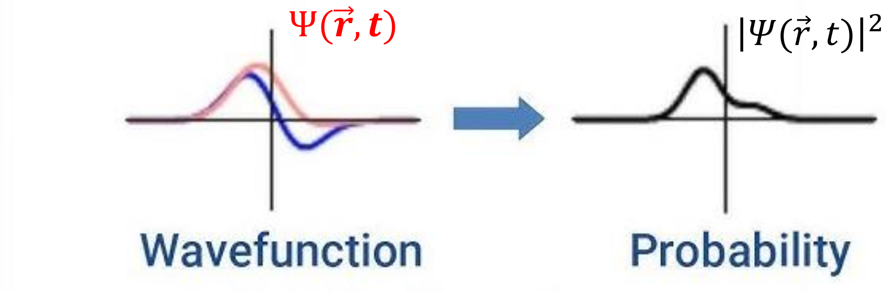
$$\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1$$

→ **interprétation probabiliste de Born**

- **La physique est dans $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ et non dans $\Psi(\vec{r}, t)$**

IV.2 Fonction d'onde

Pour décrire la physique à l'échelle des particules, il faut introduire une nouvelle fonction de position, appelée **fonction d'onde noté $\Psi(\vec{r}, t)$** tel que:



Postulat 2:

Le module carré de la fonction d'onde

$$|\Psi|^2 = \Psi^* . \Psi$$

est la densité de probabilité de présence $p(\boldsymbol{r}, t)$ de la particule au point $\vec{r}$ en fonction du temps t.

Indépendemment du temps on a aussi

$$|\psi(\boldsymbol{r})|^2 = \psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) = p(\boldsymbol{r})$$

Quel est le sens de $\boldsymbol{\Psi}$?

- La fonction d'onde de Schrödinger est une nouvelle sorte d'onde, une onde de matière
- Ψ est un champ scalaire complexe (partie réelle et imaginaire et Ψ^* est son conjugué complexe).
- dont le carré $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 \, dV$ est probabilité que la particule occupe le volume dV.
- Ψ doit être une fonction de carré sommable

$$\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1$$

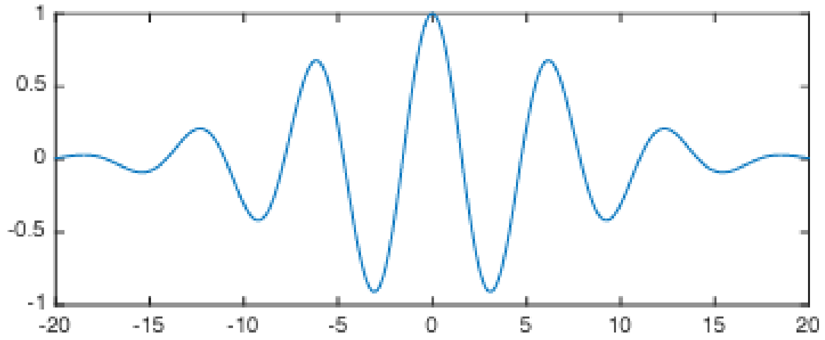
→ interprétation probabiliste de Born

- La physique est dans $|\boldsymbol{\Psi}(\vec{\boldsymbol{r}}, \boldsymbol{t})|^2$ et non dans $\boldsymbol{\Psi}(\vec{\boldsymbol{r}}, \boldsymbol{t})$

INTERPRETATION PROBABILISTE

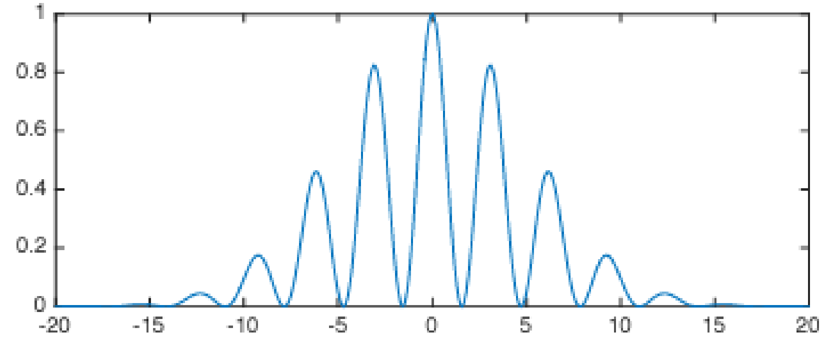
Amplitude de probabilité

$$\psi(\vec{r}, t)$$



Densité de probabilité

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2$$

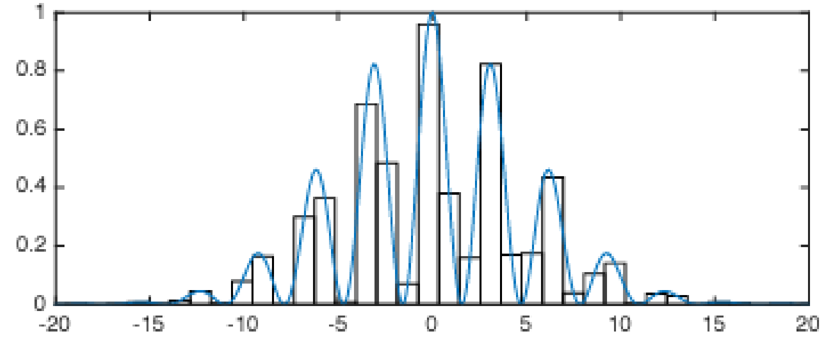


N mesures successives

On prépare successivement N fois la particule dans le même état initial.

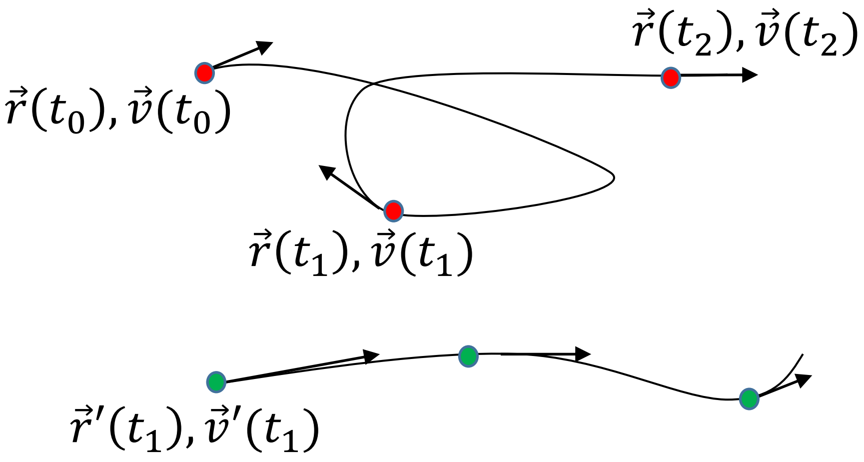
En faisant N fois la même mesure, on peut reconstituer l'histogramme ci-contre.

Si N>>1, on a une bonne approximation de la fonction d'onde



IV.2 Fonction d’onde

Particule classique



$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v} \quad ; \quad m\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{p}$$

$$m\frac{d\vec{v}}{dt} = \sum \vec{F} \quad ; \quad E = \frac{1}{2m}\vec{p}^2 + V(\vec{r}, t)$$

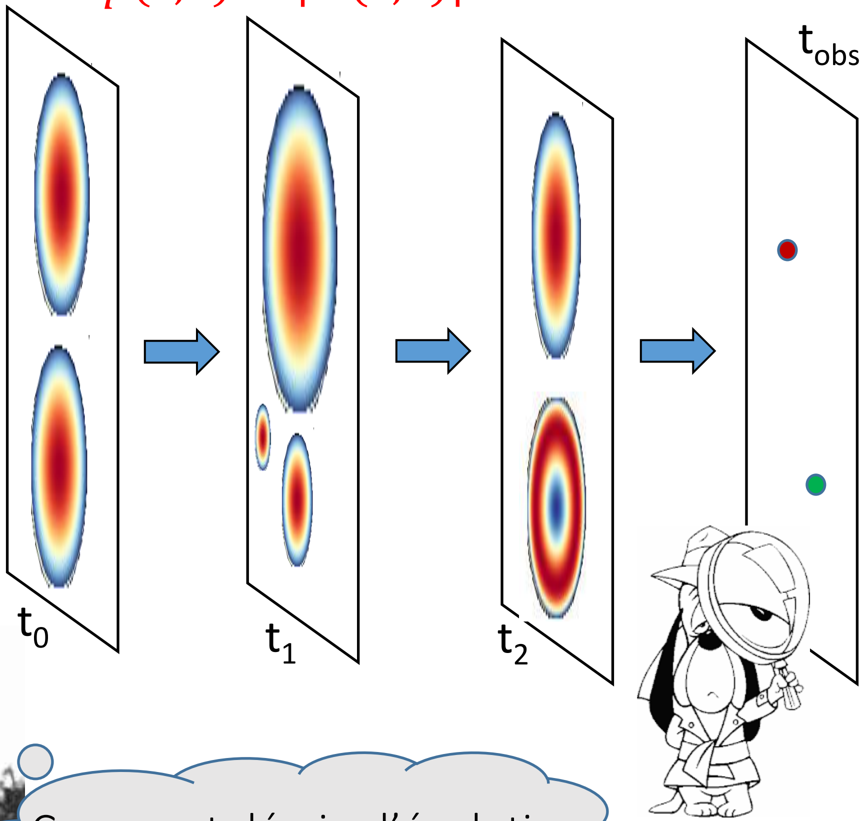
PFD de Newton

Particule quantique

Probabilité de présence en r

Fonction d\` $\left\{ \begin{array}{l} \text{état} \\ \text{onde} \end{array} \right.$

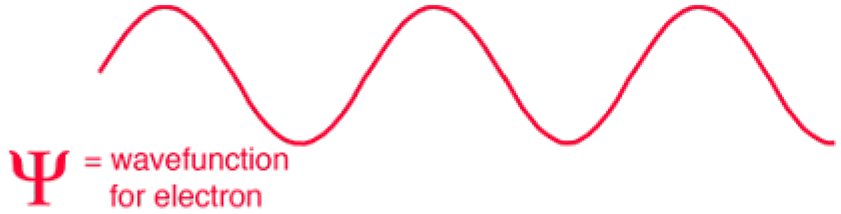
$$p(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dr$$



Comment décrire l’évolution de cette onde?

→ Équation de Schrödinger

IV.2 Fonction d'onde



A – Ondes de De Broglie

Une onde plane s'écrirait : $\boldsymbol{\Psi(\vec{r},t) = \Psi_0 e^{i(\vec{k}.\vec{r}-\omega t)}}$

de Broglie Einstein

A partir de $\vec{\boldsymbol{k}} = \frac{\vec{\boldsymbol{p}}}{\hbar}$ et $\boldsymbol{\omega} = \frac{\boldsymbol{E}}{\hbar}$ on en déduit la forme des ondes de De Broglie:

$$\boxed{\boldsymbol{\Psi(\vec{r},t) = \Psi_0 e^{i(\vec{p}.\vec{r}-Et)/\hbar}}}$$

Si la particule est libre son énergie est purement cinétique donc $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

On a donc:

$$\frac{d}{dr}\Psi = \frac{ip}{\hbar}\Psi \quad \text{et} \quad \frac{d}{dt}\Psi = -\frac{iE}{\hbar}\Psi$$

IV.2 Fonction d'onde

B – Evolution temporelle de la fonction d'onde – Equation de Schrödinger

On repart de $\frac{d}{dt}\Psi = -\frac{iE}{\hbar}\Psi$

$\Rightarrow$ $i\hbar\frac{d}{dt}\Psi = E\Psi$

On a aussi vu $\frac{d}{d\boldsymbol{r}}\Psi = \frac{i\boldsymbol{p}}{\hbar}\Psi$

$\Rightarrow$ $\boldsymbol{p}\Psi = -i\hbar\frac{d}{d\boldsymbol{r}}\Psi$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\Psi(\boldsymbol{r},t) = E\Psi$$

Pour une particule libre: $E = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\Psi(\boldsymbol{r},t) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\Psi$$

Multiplier par $\boldsymbol{p}$ revient à dériver par rapport à **r** et à multiplier par $-i\hbar$

(On dira que **p** est un opérateur noté $\hat{\mathbf{p}}$)

$$i\hbar\frac{d}{dt}\Psi(\boldsymbol{r},t) = \frac{(-i\hbar)^2}{2m}\frac{d^2}{d\boldsymbol{r}^2}\Psi(\boldsymbol{r},t)$$

$$\boxed{i\hbar\frac{d}{dt}\Psi(\boldsymbol{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\,\Psi(\boldsymbol{r},t)}$$

Equation de Schrödinger dépendante du temps pour une particule libre

IV.2 Fonction d'onde

B – Evolution temporelle de la fonction d'onde – Equation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt}\Psi(\boldsymbol{r},t) = \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}}\Delta\,\Psi(\boldsymbol{r},t)$$

Dans le cas d'une particule libre (non soumis à un potentiel), ce terme est un opérateur qui renvoie à l'énergie cinétique de la particule.

Si la particule est maintenant soumis à un potentiel (force de rappel, potentiel constant…) alors l'hamiltonien du système est construit en sommant les opérateurs correspondant aux différentes énergies du système

En 1D:

Energie cinétique : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x^2}$

Energie potentielle : $V(x)$

$\hat{H}$ l'opérateur Hamiltonien $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}(\vec{r})$

Ce qui donne…

IV.3 Equation de Schrödinger

A – Dépendant du temps

Postulat 3:

La fonction d'onde d'une particule suit l'équation d'évolution spatio-temporelle postulé par Schrödinger (1926):

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

ou

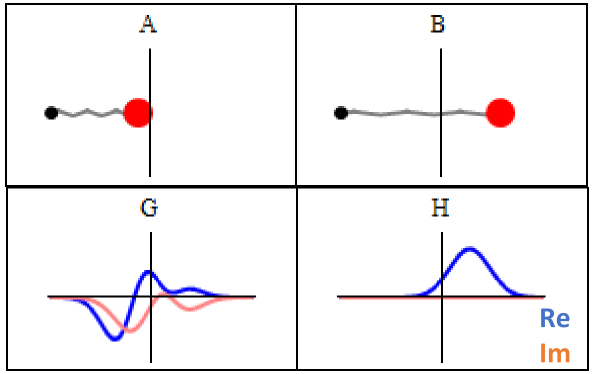
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{H}\Psi$$

avec $\hat{H}$ l'opérateur Hamiltonien $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}(\vec{r})$

partie rattachée à l'énergie cinétique

partie rattachée à l'énergie potentielle

oscillateurs classiques



Fonctions d'onde évoluant au cours du temps

Gardez en tête qu'ici $\Psi = \Psi(\vec{r},t) = \Psi(r,t)$

Pour rappel le Laplacien $\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

Anatomie de l'équation de Schrödinger

Égale à $\hat{H}\Psi$, l'Hamiltonien du système

Energie cinétique de la particule

Energie potentielle auquel est soumis la particule (décrit les forces qui agissent sur le système et nulle si la particule est libre)

Fonction d'onde qui au carré donne la densité de probabilité de présence de la particule

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Masse de la particule

Opérateur Laplacien (somme des dérivées seconde par rapport à x, y et z). Décrit comment la fonction d'onde change de forme d'un endroit à l'autre

√(-1)
Rotation de 90°
dans le plan complexe

Constante de Planck réduite

Décrit comment la fonction d'onde change de forme au cours du temps

Égale à $E\Psi$ si la fonction d'onde est stationnaire (équation indépendante du temps)

TO BE CONTINUED...

Quizz à refaire à la maison

https://app.wooclap.com/ZTHNOH/