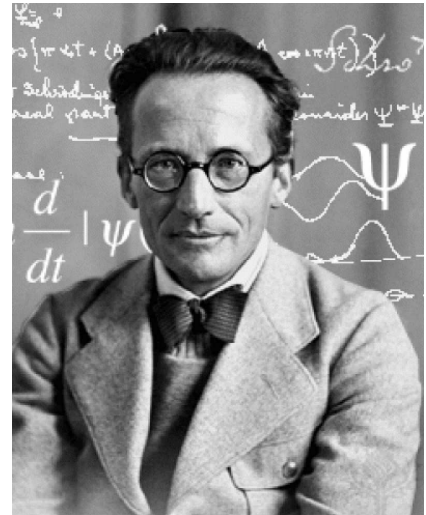


XXII

Fonction d'onde d'un objet quantique - Equation de Schrödinger



ERWIN SCHRÖDINGER
(1887-1961)

PLAN DU CHAPITRE

I	Fondements de la mécanique quantique : la fonction d'onde complexe	3
I.1	L'expérience de Davisson et Germer (1927)	3
I.2	Emergence de la fonction d'onde complexe	4
	a - Le premier postulat de la mécanique quantique	4
	b - Dualité onde corpuscule	5
I.3	Calcul de l'action : "critère" quantique	6
I.4	Densité de probabilité de présence - normalisation de la fonction d'onde	7
	a - Définition	7
	b - Condition de normalisation - exemple d'exploitation	7

c - Mesure d'une valeur moyenne d'"observable"	8
II L'équation de Schrödinger 1D non relativiste (ES1D)	9
II.1 Cas d'une particule libre	9
II.2 Cas général : l'ES1D générale - particule en présence d'un champ de force (postulat n°2)	10
II.3 Linéarité de l'ES- superposition des états quantiques	11
III Recherche des états stationnaires 1D	13
III.1 Recherche par séparation de variables - Equation de Schrödinger indépendante du temps (ESIT1D) (à retenir!!!)	13
III.2 Etats stationnaires classiques et quantiques : différence de signification	15
III.3 Superposition d'ES : construction d'un état non nécessairement stationnaire	15
a - Postulat n°3	16
b - Conséquence : superposition de deux états stationnaires \Rightarrow description d'un état non stationnaire	16
IV Etude complète de la particule libre	17
IV.1 Fonction d'onde d'une particule libre non localisée : caractère non physique des ondes de De Broglie	17
IV.2 Construction d'une onde "physique" pour la particule libre : encore le paquet d'onde!!!	18
IV.3 Relation de dispersion de la particule libre - vitesse de groupe du paquet - étalement de $\rho(x, t)$	19
IV.4 Principe d'incertitude d'Heisenberg	20
a - Enoncé	20
b - Interprétation physique	21
IV.5 Courant de probabilité - analogie avec l'EM	22

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

1.1 L'expérience de Davisson et Germer (1927)

PRINCIPE : bombardement d'une cible de Nickel cristallin par un faisceau d'électrons :

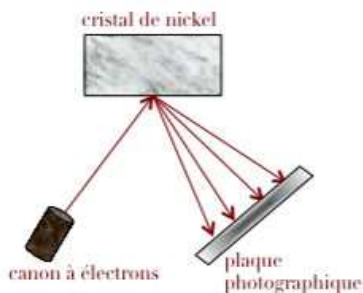


FIGURE XXII.1 – Expérience de Davisson et Germer : vue générale (1927)

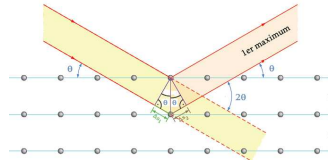


FIGURE XXII.2 – Expérience de Davisson et Germer : interférences constructives avec des électrons

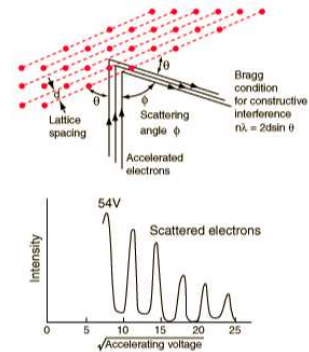


FIGURE XXII.3 – Expérience de Davisson et Germer : longueur d'onde et vitesse

OBSERVATIONS :

- 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) :

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

Davisson et Germer observent le même comportement mais avec un faisceau d'électrons

► **CONCLUSION** : prouve que les électrons possèdent des propriétés ondulatoires \Rightarrow 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 associée \Rightarrow **existence d'une fonction d'onde!!!**

I.2 Emergence de la fonction d'onde complexe

a - Le premier postulat 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** \Rightarrow **propriétés corpusculaires** ("boule billard")
- Les électrons diffractent et interfèrent au même titre que les ondes lumineuses \Rightarrow **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 particulière, mais sans localisation précise i.e. on abandonne le caractère déterministe de la mécanique, et on ajoute le caractère ondulatoire \Rightarrow

Propriété I-1: POSTULAT N°1 : LA FONCTION D'ONDE

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 :

$$\psi(\vec{r}, t) \quad (\text{XXII.1})$$

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

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

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 \implies 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 \implies Louis de Broglie pose onde associée de type **onde plane** de forme :

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

NB : on notera le choix de la convention d'écriture du terme de phase de l'onde.

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

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

Si une onde est associée à la particule, elle doit naturellement se déplacer avec elle ; on lui associe alors assez logiquement comme vitesse la **vitesse de groupe** (et non la vitesse de phase que ne correspond pas à une vitesse de propagation "physique" : énergie/information ou masse¹). 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 : $\frac{d\omega}{dv} = \frac{mv}{\hbar}$

Donc :

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

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

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: ONDE DE DE BROGLIE

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" :

$$\text{Dualité onde corpuscule} \Leftrightarrow \left[\begin{array}{l} \hbar \vec{k} = m \vec{v} = \vec{p} \\ \text{ou} \\ \frac{h}{\lambda} \cdot \vec{i} = \vec{p} \end{array} \right]$$

avec λ longueur d'onde associée à la particule.

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** : $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$, qui constitue le **quantum d'action élémentaire** autrement dit, plus petit quantum d'action.

On peut dégager un ordre de grandeur de l'action d'un système mécanique en évaluant le produit de sa quantité de mouvement caractéristique p_c par une longueur caractéristique L_c de ce système :

$$S \sim p_c \times L_c$$

Propriété I-3: CRITÈRE QUANTIQUE POUR SYSTÈME D'ACTION S

NB : la constante de planck $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$ est homogène à une action et elle correspond à la plus petite action indivisible (quantum d'action).

$$\left[\begin{array}{l} S \sim p_c \times L_c \gg h \Rightarrow \text{le système est classique} \\ S \sim p_c \times L_c \sim h \Rightarrow \text{le système est quantique} \end{array} \right]$$

Remarque I-1: AUTRE FORMULATION EN TERME DE LONGUEUR D'ONDE :

Comme $p_c = \hbar k_c = \frac{h}{\lambda_c}$, on a :

$$\left[\begin{array}{l} L_c \gg \lambda = \frac{h}{p_c} \Rightarrow \text{classique} \\ L_c \sim \lambda = \frac{h}{p_c} \Rightarrow \text{quantique} \end{array} \right]$$

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

Système	masse (kg)	vitesse (m.s ⁻¹)	L_c (m)	$\frac{S}{h}$	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	$9,1 \cdot 10^{-31}$	10^4	10^{-10}	$10^{-3} \ll 1$	quantique !!!

A RETENIR :

Propriété I-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 $d\tau(\vec{r})$ autour de la position \vec{r} :

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

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

Propriété I-5:

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

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 probabilités élémentaires sur tout l'espace doit obligatoirement valoir l'unité à tout instant. On appelle cela la **condition de normalisation** :

Propriété I-6: CONDITION DE NORMALISATION

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

CAS IMPORTANT 1D (PÉDAGOGIQUE !) : si l'on suppose que l'espace accessible au système quantique (particule) est réduit à un axe (x'), alors la relation précédente devient :

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

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

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

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 :

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \sum_i p_i \mathcal{A}_i$$

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

Propriété I-7: VALEUR MOYENNE D'UN OBSERVABLE

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

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \int_{\text{espace}} \mathcal{A} \cdot dP = \int_{\text{espace}} \mathcal{A} \cdot |\psi(\vec{r}, t)|^2 \cdot d\tau(\vec{r})$$

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 $\hbar = \frac{h}{2\pi} : k = \frac{2\pi p}{h} = \frac{mv}{\hbar}$
- D'après la relation de Planck-Einstein : $E = h\nu = \hbar\omega$ soit : $\omega = \frac{E}{\hbar}$
- L'énergie de la particule limitée à l'énergie cinétique puisque cette dernière est libre est : $E_c = E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$
soit : $k^2 = \frac{2mE_c}{\hbar^2} = \frac{2mE}{\hbar^2}$

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 :

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

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

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

et finalement **l'équation de Schrödinger 1D pour une particule libre :**

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

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

II.2 Cas général : l'ES1D générale - 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, c'est à dire dérivant d'une énergie potentielle $V(\vec{r})$ indépendante du temps.

Nous limitons l'approche au cas d'une particule contrainte de se déplacer sur un axe (x), donc le potentiel est 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 $\frac{1}{k^2} = \frac{\hbar^2}{2mE_c}$ 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-1: POSTULAT N°2 : EQUATION DE SCHRÖDINGER

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) :

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

Cette équation se généralise à 3D avec :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}, t) = j \hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (\text{XXII.4})$$

Remarque II-1:

- On peut définir $\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \stackrel{3D}{\equiv} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right]$ l'opérateur Hamiltonien du système, permettant d'écrire l'ES3D sous forme plus synthétique avec :

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

- 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-2:

L'équation de Schrödinger est linéaire.

CONSÉQUENCE : toute combinaison linéaire de solutions est également solution :

$$\{\psi_1(\vec{r}, t), \psi_2(\vec{r}, t), \dots, \psi_n(x, t)\} \text{ solutions de l'ES} \implies \sum_{i=1}^n \alpha_i \psi_i(\vec{r}, t) \text{ solutions de l'ES}$$

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 : comment décrire l'interférence à l'aide des fonctions d'onde ?

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

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 :

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

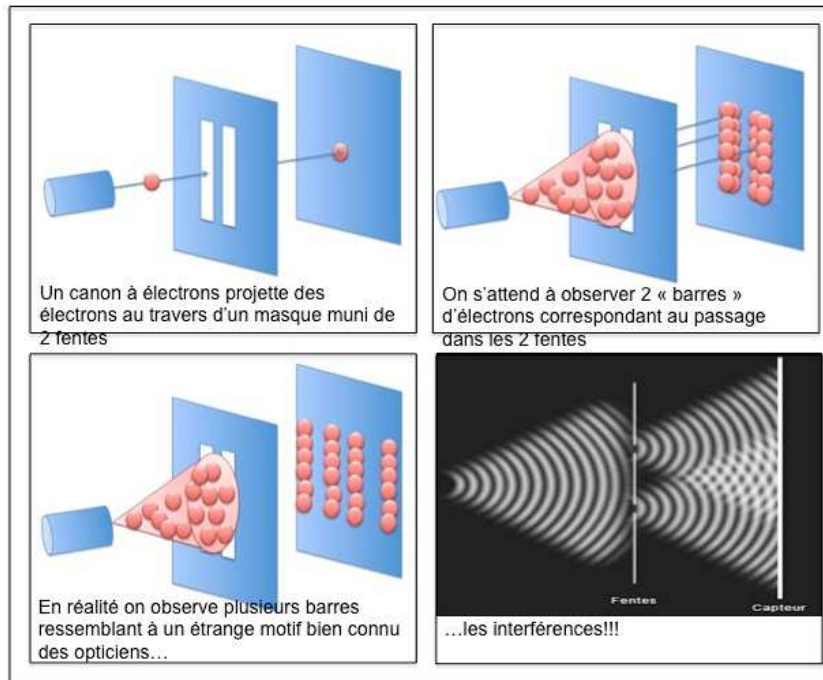


FIGURE XXII.4 – Expérience des fentes d'Young réalisée avec des électrons - résultats

soit :

$$\rho(M, t) = \underbrace{|\alpha_g \cdot \psi_g(M, t)|^2}_{\text{électron passant par fente gauche}} + \underbrace{|\alpha_d \cdot \psi_d(M, t)|^2}_{\text{électron passant par fente gauche}} + \underbrace{(\alpha_g \alpha_d^* \cdot \psi_g(M, t) \cdot \psi_d^*(M, t) + \alpha_g^* \alpha_d \cdot \psi_g(M, t)^* \cdot \psi_d(M, t))}_{\text{terme "d'interférences quantiques"}} \quad (\text{XXII.5})$$

Remarque II-2:

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 :

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

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 (ES1D) (à retenir!!!)

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

HYPOTHÈSES :

- potentiel indépendant du temps : $V(x)$
- donc : énergie mécanique conservée : $E = cste$

⇒ on recherche des états particuliers du système auxquels on peut attribuer une énergie E (constante) appelés **états stationnaires**.

Définition III-1: ETATS STATIONNAIRES

Un système quantique soumis à un potentiel indépendant du temps $V(x)$ possède des états particuliers pour lesquels l'énergie est constante. Ces états sont nommés **états stationnaires**

PRINCIPE : 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 :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} + V(x) = E \\ j\hbar \frac{\chi'(t)}{\chi(t)} = E \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \\ \frac{\chi'(t)}{\chi(t)} = -j\frac{E}{\hbar} \end{cases}$$

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

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

et la seconde équation se résoud immédiatement avec :

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

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

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

SIGNIFICATION DE E :

Cette solution correspond à une évolution temporelle harmonique à la pulsation $\omega = \frac{E}{\hbar}$, 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:

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

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

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

Remarque III-1:

On exclut dans cette étude le cas $E < 0$, puisque l'énergie de la particule libre est exclusivement d'origine cinétique avec $E = E_c > 0$ (le cas $E < 0$ conduirait de toute façon à des exponentielles d'arguments réels évanescents ou bien divergentes, ce qui n'aurait pas de sens ici).

La solution complète est donc pour une énergie $E > 0$ 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 remarques :

- **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, donc pas celle d'une **onde stationnaire** au sens classique.

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:

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

a - Postulat n°3

Propriété III-2: POSTULAT N°3 : —

Les fonctions d'onde $\psi(x, t)$ des états stationnaires de l'énergie d'un système quantique constituent une base orthonormée de l'espace des fonctions d'onde d'états quelconques de ce système (Espace de Hilbert : espace des fonctions de carré sommable).

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 :

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

b - Conséquence : superposition de deux états stationnaires \Rightarrow description d'un état non stationnaire

Soient deux états stationnaires d'énergies respectives E_1 et E_2 et de fonctions d'onde :

$$\begin{cases} \psi_1(x, t) = \varphi_1(x) \cdot e^{-j \frac{E_1 t}{\hbar}} \\ \psi_2(x, t) = \varphi_2(x) \cdot e^{-j \frac{E_2 t}{\hbar}} \end{cases}$$

d'un système quantique quelconque.

Une combinaison linéaire de ces deux états est par exemple :

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

La densité de probabilité de présence de cet état est :

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

soit :

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

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 :

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

INTERPRÉTATION :

Cet état quantique possède une densité de probabilité de présence qui évolue de manière harmonique du temps, avec pour une position x donnée, une alternance d'instants où la densité de probabilité de présence de la particule est "forte", donc pour $\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar} + \theta = 2p\pi$, et d'instants où celle-ci est "faible" pour $\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar} + \theta = (2p+1)\pi$. L'état décrit n'est donc pas un état stationnaire quantique.

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 :

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

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 :

$$\psi(x, t) = A \cdot e^{j(kx - \omega t)} \quad \text{en posant } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \text{ et } \omega = \frac{E}{\hbar}$$

et tentons de la normaliser :

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

A RETENIR :

Propriété IV-1:

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 : encore 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 :

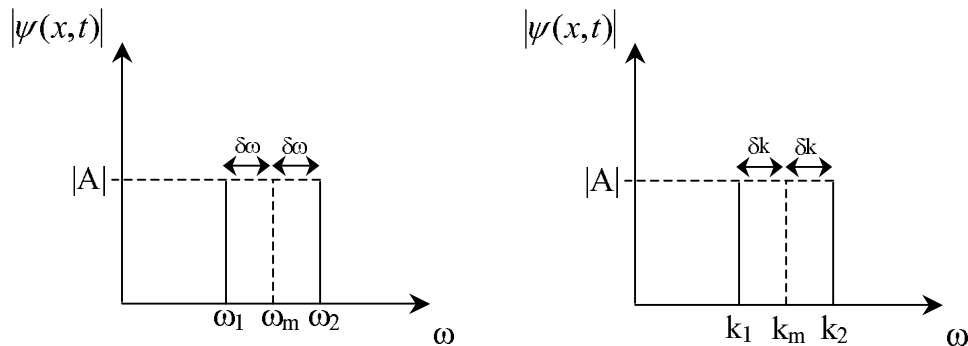


FIGURE XXII.5 – Représentation spectrale d'un "paquet" de deux ondes de De Broglie

$$\psi(x, t) = \psi_1(x, t) + \psi_2(x, t) = A \left[e^{j(k_1 x - \omega_1 t)} + e^{j(k_2 x - \omega_2 t)} \right] = A \left[e^{j((k_m - \delta k)x - (\omega_m - \delta \omega)t)} + e^{j((k_m + \delta k)x - (\omega_m + \delta \omega)t)} \right]$$

soit :

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

La densité de probabilité de présence donne :

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

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:

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

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

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 $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$:

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

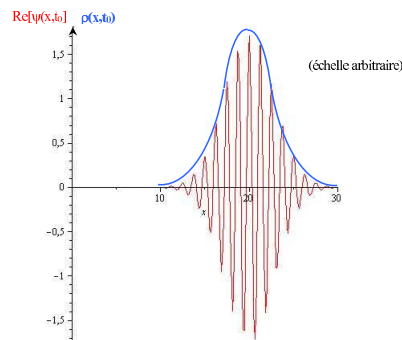


FIGURE XXII.6 – Partie réelle de fonction d'onde et densité de probabilité de présence d'un paquet d'onde

Remarque IV-1: RELATION DE DISPERSION QUANTIQUE DE LA PARTICULE LIBRE

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-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 : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = j\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \hbar\omega$
soit finalement :

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

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.

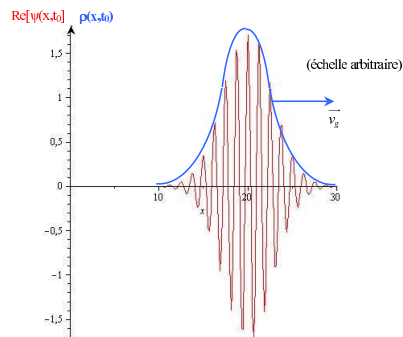


FIGURE XXII.7 – Déplacement du paquet d'ondes à la vitesse de groupe \equiv vitesse de la particule

Remarque IV-2:

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 \Rightarrow au fur et à mesure de son déplacement, on "perd" la capacité à repérer précisément la particule dans l'espace.

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 : $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \Rightarrow \Delta\omega = \frac{\hbar k}{m} \Delta k$

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

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 de dualité onde-corpuscule de De Broglie $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$, la relation précédente prend la forme de la propriété suivante :

Propriété IV-3: RELATION D'INCERTITUDE DE HEISENBERG

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 :

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

Remarque IV-3:

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

HYPOTHÈSE : on suppose une particule libre

Envisageons deux situations différentes :

- si le système quantique préparé dans un état de position assez bien connue :

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

CONCLUSION :

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 :

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

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:

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	$\frac{\partial \rho_e(\vec{r}, t)}{\partial t} + \text{div} \vec{J}_e(\vec{r}, t) = 0$	$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \text{div} \vec{J}(\vec{r}, t) = 0$ 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:

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.