Des ondes pour modéliser des particules

L'onde plane : $\psi(\vec{r},t) = Ae^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$

Le paquet d'ondes : $\boxed{\psi(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \iiint \varphi(\vec{k})\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\, d^3k}$

Cas simple : $\omega = c\left|\vec{k}\right|$ sans dispersion

Cas général : $\omega(\vec{k}) = \omega_0 + \left.\frac{\partial \omega}{\partial \vec{k}}\right|_{\vec{k}_0} \cdot \left(\vec{k} - \vec{k}_0\right) + \ldots$

$$\psi(\vec{r},t) \approx \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \iiint \varphi(\vec{k})\, e^{i(\vec{k}_0\cdot\vec{r}-\omega_0 t)}\, e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0)\cdot\left(\vec{r}-\frac{\partial\omega}{\partial\vec{k}}t\right)}\, d^3k$$

La phase « tourne » à une vitesse ω_0

Le paquet « avance » à une vitesse $\vec{v}_g = \left.\frac{\partial \omega}{\partial \vec{k}}\right|_{\vec{k}_0}$ **vitesse de groupe**

Peut-on encore voir la trajectoire ?

Tout le long de la trajectoire classique, il y a incertitude sur la position et l'impulsion de la particule

Acquisition de la position : échange d'impulsion avec un photon

La précision de la mesure est déterminée par l'énergie, donc par la longueur d'onde du photon.

Exemple : les orbites de l'atome de Bohr

$$\boxed{E_n = \frac{1}{2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)^2 \frac{m_e c^2}{n^2}}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$ constante de structure fine

rayon de Bohr : $$a_B = \frac{\hbar}{\alpha m_e c}$$

$$E_1 = \frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 = \boxed{\frac{\alpha}{4\pi}\frac{hc}{a_B} \quad !!!}$$

MINES ParisTech

Les pères fondateurs

Max Born
(1882 - 1970)

Werner Heisenberg
(1901 - 1976)

Pascual Jordan
(1902 - 1980)

Erwin Schrödinger
(1887 - 1961)

Les fondements de la mécanique quantique

- Une particule est représentée par une onde « amplitude de probabilité » complexe, appelée « amplitude de probabilité » (ou « **fonction d'onde** »).
- Le module carré de cette amplitude de probabilité définit une densité de probabilité de présence de la particule. L'intégrale de cette dernière vaut donc 1.
- Ces nouveaux objets sont soumis au **principe de superposition** : la somme de deux amplitudes de probabilité représente encore une amplitude de probabilité.
- Les quantités mesurables sont représentées par des **observables** : ce sont des opérateurs qui agissent sur les fonctions d'onde.
- Ils existent des quantités que l'on ne peut mesurer **simultanément** avec une précision arbitraire comme par exemple ***x*** et ***p***.

La mesure quantique

- La particule est caractérisée par une dualité onde-corpuscule. On ne retrouve la particule classique que lors d'une mesure.
- Il n'y a plus répétabilité exacte mais statistique du processus de mesure.
- Certaines grandeurs ne peuvent être mesurées simultanément avec une précision infinie.
- Il y a séparation entre les processus d'évolution internes, gouvernés par des amplitudes, et les processus de mesure externes, gouvernés par des probabilités

L'amplitude de probabilité

$\psi(\vec{r},t) \in \mathbb{C}$: amplitude de probabilité complexe

$P(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2 \in \mathbb{R}_+$: densité de probabilité de présence

$$\iiint_\Omega P(\vec{r},t)\, d^3r = \iiint_\Omega |\psi(\vec{r},t)|^2\, d^3r = 1$$

Représentation dans l'espace des impulsions

$$\varphi(\vec{p},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \iiint \psi(\vec{r},t)\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)}\, d^3r$$

Théorème de Parseval : $\boxed{\iiint_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{r},t)|^2\, d^3r = \iiint_{\mathbb{R}^3} |\varphi(\vec{p},t)|^2\, d^3p}$

L'espace de Hilbert

L'espace de ces fonctions complexes possède une structure d'espace de Hilbert : espace vectoriel normé (complet).

Dans une boîte de volume fini Ω : $\psi(\vec{r},t) = \frac{1}{\sqrt{|\Omega|}} \sum_n c_n(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}_n \cdot \vec{r}\right)$

Les fonctions $\left\{ \frac{1}{\sqrt{|\Omega|}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}_n \cdot \vec{r}\right) \right\}$ représentent une base

orthonormée d'ondes planes :

$$\boxed{\iiint \frac{1}{\sqrt{|\Omega|}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p}_n \cdot \vec{r}\right) \frac{1}{\sqrt{|\Omega|}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}_m \cdot \vec{r}\right) d^3r = \delta_{n,m}}$$

Les opérateurs *position* et *impulsion*

La valeur moyenne de la position s'obtient en utilisant la définition de la densité de probabilité

$$\langle x \rangle = \iiint_\Omega x\, P(\vec{r},t)\, d^3r = \iiint_\Omega x\, |\psi(\vec{r},t)|^2\, d^3r$$

$$\langle \vec{r} \rangle = \iiint_\Omega \vec{r}\, P(\vec{r},t)\, d^3r = \iiint_\Omega \vec{r}\, |\psi(\vec{r},t)|^2\, d^3r$$

De même pour la valeur moyenne de l'impulsion

$$\langle \vec{p} \rangle = \iiint_{\Omega^*} \vec{p}\, P(\vec{p},t)\, d^3p = \iiint_{\Omega^*} \vec{p}\, |\varphi(\vec{p},t)|^2\, d^3p$$

Dans les deux cas, on peut écrire :

$$\langle A \rangle = \iiint_\Omega \psi^*(\vec{r},t)\ \hat{A}\ \psi(\vec{r},t)\, d^3r$$

$$= \iiint_{\Omega^*} \varphi^*(\vec{p},t)\ \hat{A}\ \varphi(\vec{p},t)\, d^3p$$

$$\hat{\vec{r}} = \vec{r}\times \qquad \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \vec{r}}$$

$$\hat{\vec{r}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial \vec{p}} \qquad \hat{\vec{p}} = \vec{p}\times$$

Calcul d'une valeur moyenne

En représentation x $$\langle A \rangle = \iiint \psi^*(\vec{r})\hat{A}\,\psi(\vec{r})\,d^3r$$

En représentation p $$\langle A \rangle = \iiint \varphi^*(\vec{r})\hat{A}\,\varphi(\vec{r})\,d^3p$$

Principe de correspondance : dans la limite $\hbar \to 0$, on retrouve les expressions des quantités classiques.

<u>Conséquence</u> : on va obtenir les opérateurs quantiques en « traduisant » les expressions classiques.

L'ordre des opérateurs a une importance ! Contrairement aux scalaires, $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$

Commutateur de $\hat{A}$ **et** $\hat{B}$ **:** $$\boxed{\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}$$

L'énergie d'une particule libre

Classiquement, l'énergie d'une particule libre est : $E = \dfrac{p^2}{2m}$

L'impulsion le long de Oy va donc s'obtenir par :

$$\langle p_y^2 \rangle = \iiint_{\mathrm{dual}(\Omega)} \varphi^*(\vec{p},t)\ p_y^2\ \varphi(\vec{p},t)\ d^3p$$

En représentation x : $$\langle p_y^2 \rangle = \iiint_{\Omega} \psi^*(\vec{r},t) \boxed{\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\right)^2} \psi(\vec{r},t)\ d^3r$$

opérateur $\hat{p}_y^2$

On définit l'opérateur ***Hamiltonien*** $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m}$

Pour une particule dans un potentiel V

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}$$ avec $$\boxed{\hat{V}\psi = V(\vec{r})\,\psi(\vec{r},t)}$$

L’équation d’évolution

Erwin Schrödinger
(1887 - 1961)

Particule libre : $E = \hbar\omega = \dfrac{p^2}{2m}$

Superposition d’ondes planes de même énergie

$$\psi(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint \phi(\vec{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)}\, d^3p$$

donc $\varphi(\vec{p},t) = \phi(\vec{p})\, e^{\frac{iEt}{\hbar}}$

$$\frac{\partial\varphi(\vec{p},t)}{\partial t} = \frac{iEt}{\hbar}\varphi(\vec{p},t)$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}\psi(\vec{r},t)$$

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

Équation de Schrödinger

Propriétés de l'équation de Schrödinger

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

Linéaire → **principe de superposition** : la somme de deux solutions est encore une solution.

Linéaire → une relation de dispersion **non linéaire** débouche sur un étalement **croissant** de l'onde libre !

Les états stationnaires

Etats dont la densité de probabilité est constante au cours du temps : ce sont les **états propres** du Hamiltonien.

$$\boxed{\hat{H}\,\psi(\vec{r},t) = E\psi(\vec{r},t)}$$

Équation de Schrödinger indépendante du temps

Considérons un tel état. Il obéit à l'équation d'évolution :

$$\hat{H}\,\psi = i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad \text{donc} \quad i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t} = E\psi$$

$$\psi(\vec{r},t) = e^{\frac{E}{i\hbar}t}\;\Psi(\vec{r}) = e^{-i\omega t}\;\Psi(\vec{r}) \quad \text{avec} \quad \boxed{\begin{array}{l} \hat{H}\Psi = E\,\Psi \\ E = \hbar\omega \end{array}}$$

La probabilité de présence est inchangée : $P(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2 = |\Psi(\vec{r})|^2$

Spectre du Hamiltonien = spectre discret + spectre continu

Licence d’usage dans un contexte public, sans modification