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 :
$$\left|\psi(\vec{r},t)=rac{1}{(2\pi)^{rac{3}{2}}}\int\int\int\int arphi(\vec{k})\,e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\,d^3k
ight|$$

Cas simple :
$$\omega = c |ec{k}|$$
 sans dispersion

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

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

La phase « tourne » à une vitesse ω_0

Le paquet « avance » à une vitesse
$$ec{v}_g=rac{\partial \omega}{\partial ec{k}}igg|_{ec{k}_o}$$
 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

$$E_n = \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 \hbar c} \right)^2 \frac{m_e c^2}{n^2} \qquad \alpha = \frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad \text{constante de structure fine}$$
 rayon de Bohr:
$$a_B = \frac{\hbar}{\alpha m_e c} \qquad E_1 = \frac{1}{2} \alpha^2 m_e c^2 = \frac{\alpha}{4\pi} \frac{hc}{a_B} \quad \text{III}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad \frac{\text{con}}{\text{stru}}$$

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

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



Les pères fondateurs



Werner Heisenberg (1901 - 1976)



Max Born (1882 - 1970)



Erwin Schrödinger (1887 - 1961)



Pascual Jordan (1902 - 1980)



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 :
$$\left|\iint_{\mathbb{R}^3} \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3r = \iiint_{\mathbb{R}^3} \left|\varphi(\vec{p},t)\right|^2 d^3p \right|$$



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
$$\Omega: \ \psi(\vec{r},t) = \frac{1}{\sqrt{|\Omega|}} \sum_n c_n(t) \ \exp\Bigl(\frac{i}{\hbar} \, \vec{p_n} \cdot \vec{r}\Bigr)$$

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 :

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



Les opérateurs position et impulsion

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

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

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 :

$$\langle A \rangle = \iiint_{\Omega} \psi^*(\vec{r}, t) \ \hat{A} \ \psi(\vec{r}, t) \ d^3r \qquad \qquad \hat{\vec{r}} = \vec{r} \times \qquad \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}}$$
$$= \iiint_{\Omega^*} \varphi^*(\vec{p}, t) \ \hat{A} \ \varphi(\vec{p}, t) \ d^3p \qquad \qquad \hat{\vec{r}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \qquad \hat{\vec{p}} = \vec{p} \times$$

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

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



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.

Conséquence : 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} :

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



L'énergie d'une particule libre

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

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

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

$$\text{En représentation } x \colon \left\langle p_y^2 \right\rangle = \iiint_{\Omega} \psi^*(\vec{r},t) \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 \right] \psi(\vec{r},t) \; d^3r$$
 opérateur \hat{p}_y^2

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

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m}$$

Pour une particule dans un potentiel $oldsymbol{V}$

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



L'équation d'évolution



Erwin Schrödinger (1887 - 1961)

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

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

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

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

$$\left| \hat{H}\psi = i\hbar rac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t}
ight|$$

Équation de Schrödinger



Propriétés de l'équation de Schrödinger

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

Linéaire \rightarrow principe de superposition : la somme de deux solutions est encore une solution.

Linéaire \rightarrow 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.

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

Équation de Schrödinger indépendante du temps

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

$$\begin{split} \hat{H}\,\psi &= i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t} &\quad \mathrm{donc} \quad i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t} = E\psi \\ \psi(\vec{r},t) &= e^{\frac{E}{i\hbar}t}\,\,\Psi(\vec{r}) = e^{-i\omega t}\,\,\Psi(\vec{r}) \quad \mathrm{avec} \quad \ \ &\quad \hat{H}\Psi = E\,\Psi \\ E &= \hbar\omega \end{split}$$

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

Spectre du Hamiltonien = spectre discret + spectre continu



Licence d'usage dans un contexte public, sans modification

La licence confère à l'utilisateur un droit d'usage sur le document consulté ou téléchargé, totalement ou en partie, dans les conditions définies ci-après et à l'exclusion expresse de toute utilisation commerciale. Le droit d'usage défini par la licence autorise un usage à destination de tout public qui comprend :

- Le droit de reproduire tout ou partie du document sur support informatique ou papier,
- Le droit de diffuser tout ou partie du document au public sur support papier ou informatique, y compris par la mise à la disposition du public sur un réseau numérique.

Aucune modification du document dans son contenu, sa forme ou sa présentation n'est autorisée. Les mentions relatives à la source du document et/ou à son auteur doivent être conservées dans leur intégralité.

Le droit d'usage défini par la licence est personnel, non exclusif et non transmissible. Tout autre usage que ceux prévus par la licence est soumis à autorisation préalable et expresse de l'auteur.



