

MQ1 – Équation de Schrödinger pour une particule libre

6.5. Approche ondulatoire de la mécanique quantique		
6.5.1. Amplitude de probabilité		
Fonction d'onde $\psi(x, t)$ associée à une particule dans un problème unidimensionnel. Densité linéique de probabilité de présence.	Normaliser une fonction d'onde. Relier qualitativement la fonction d'onde à la notion d'orbitale en chimie.	On fera le lien avec la 1s.
Principe de superposition. Interférences.	Relier la superposition de fonctions d'ondes à la description d'une expérience d'interférences entre particules.	
6.5.2. Équation de Schrödinger pour une particule libre		
Équation de Schrödinger.	Utiliser l'équation de Schrödinger fournie.	Celle-ci est donc donnée.
États stationnaires.	Associer les états stationnaires aux états d'énergie déterminée. Établir et utiliser la forme : $\Psi(x, t) = \varphi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$ pour la fonction d'onde d'un état stationnaire et l'associer à la relation de Planck-Einstein. Distinguer l'onde associée à un état stationnaire en mécanique quantique d'une onde stationnaire au sens usuel de la physique des ondes.	
Paquet d'ondes associé à une particule libre. Relation $\Delta k_x \Delta x \geq 1/2$	Utiliser l'équation de Schrödinger pour déterminer la partie spatiale $\varphi(x)$ des fonctions d'onde stationnaires décrivant une particule libre. Identifier la vitesse d'une particule libre et la vitesse du paquet d'ondes la décrivant. Exploiter l'inégalité de Heisenberg pour relier l'étendue spatiale et l'étendue spectrale du paquet d'ondes décrivant une particule libre.	
Courant de probabilité associé à une particule libre.	Utiliser l'expression admise du courant de probabilité associé à une particule libre et l'interpréter comme un produit densité*vitesse.	

I – Ondes ou particules

I-1) Interférences avec des ondes lumineuses

a) Dualité onde-corpuscule

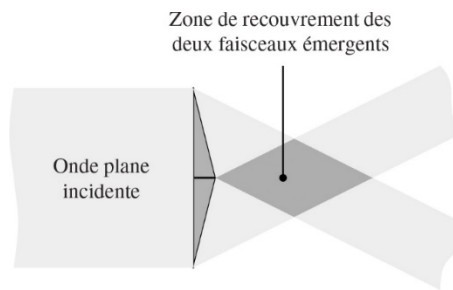
De façon très imagée, un photon peut être considéré comme une « particule de lumière ». Son énergie E_{photon} et sa quantité de mouvement \vec{p}_{photon} sont des quantités indivisibles et sont respectivement appelées quantum d'énergie et de quantité de

mouvement. L'énergie E_{photon} est liée à la fréquence de l'onde électromagnétique associée par la relation de Planck-Einstein.

- Relation de Planck-Einstein : $E_{\text{photon}} = h\nu = \hbar\omega$
- Relation de De Broglie : $\vec{p}_{\text{photon}} = \hbar \vec{k} = \frac{h}{\lambda} \vec{u}$
- Photon, particule de masse nulle telle que :

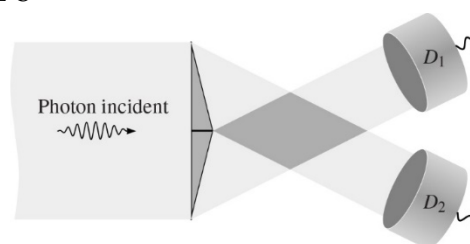
$$E_{\text{photon}} = c p_{\text{photon}}$$
- Constante de Planck : $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{Js}$ et $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

b) Expérience d'interférences



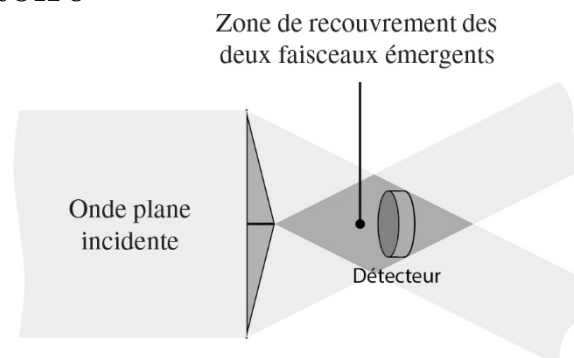
Le dispositif expérimental est un interféromètre à division du front d'onde constitué d'un biprisme de Fresnel. Le biprisme est éclairé en incidence normale. Chaque moitié du faisceau est déviée par un des deux prismes. Les deux faisceaux déviés se superposent à la sortie du dispositif dans un volume de l'espace. D'un point de vue classique, ce dispositif offre deux chemins à la lumière, qui peut passer par le prisme supérieur ou inférieur. La source lumineuse utilisée dans cette expérience est une source à photons uniques. Elle est capable de délivrer les photons les uns après les autres.

c) Aspect particulaire

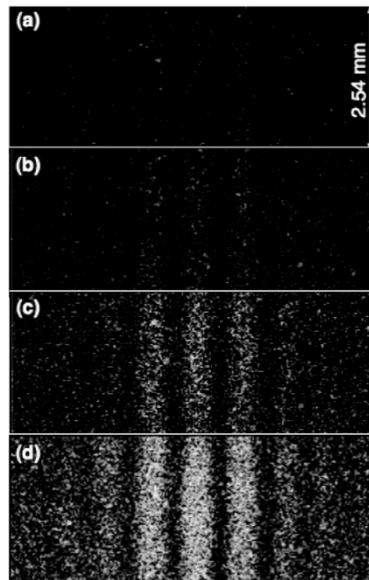


Dans une première configuration de l'expérience, deux détecteurs sont placés dans les positions D_1 et D_2 . Un dispositif électronique compte les évènements, appelés coïncidences, où les deux détecteurs délivrent simultanément un signal. L'expérience montre l'absence de coïncidences et atteste d'un comportement particulière de la lumière. Selon une image classique, le photon passe par la voie supérieure ou inférieure, il ne se scinde pas. Le résultat de l'expérience certifie que l'énergie indivisible associée au photon est détectée par un seul des deux détecteurs mais jamais les deux à la fois. Le modèle ondulatoire de la lumière n'exclut pas que les deux détecteurs puissent recevoir simultanément une même quantité d'énergie lumineuse, provenant de la scission de l'énergie du photon selon les deux voies de l'interféromètre : c'est en désaccord avec l'expérience.

d) Aspect ondulatoire



Dans une seconde configuration de l'expérience, on place un détecteur dans le champ d'interférences, c'est-à-dire dans la zone de recouvrement des deux faisceaux lumineux qui émergent du biprisme. Chaque image acquise par le détecteur correspond à une durée de comptage d'une seconde et à la détection d'une dizaine de photons environ. Ces images sont cumulées sur la figure suivante.



$(a) = 10$ clichés, $(b) = 100$, $(c) = 500$ et $(d) = 2000$

On visualise la construction progressive des franges d'interférences au fur et à mesure que les photons sont détectés. Les mesures s'accordent remarquablement bien avec la distribution d'éclairement prévue par l'optique ondulatoire. Cette expérience est complémentaire de la précédente : elle n'apporte pas d'information sur la voie de l'interféromètre suivie par un photon détecté. Lorsqu'on observe la figure d'interférences, on ne peut pas savoir par quelle voie est passé chaque photon détecté. La notion de rayon lumineux, en tant que trajectoire des photons, n'a donc ici pas de sens.

e) Conclusion

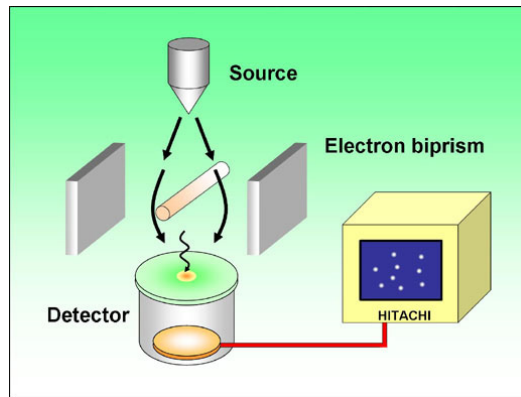
Il faut renoncer à utiliser une description classique (onde ou particule) pour décrire de façon satisfaisante et unique la lumière. La première expérience présentée trouve son interprétation dans une description particulaire et la seconde dans une interprétation ondulatoire. La mécanique quantique offre une description unique et précise de la lumière. Elle permet de calculer la probabilité de détection d'un photon en un point donné.

I-2) Interférences avec des ondes de matière

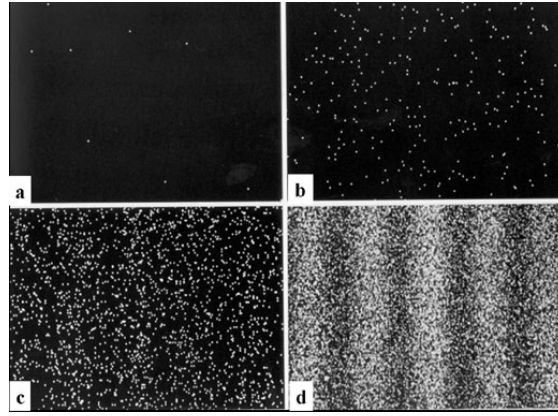
En 1923, Louis de Broglie émet l'hypothèse que la notion de dualité onde-particule peut être étendue à la matière.

$$\text{Pour une particule : } p = \frac{h}{\lambda}$$

Afin d'illustrer les idées de L. de Broglie, nous présentons une expérience d'interférences avec des électrons. Le dispositif interférentiel utilisé par Tonomura en 1989 est analogue à un biprisme de Fresnel.



Des électrons, émis par une électrode, sont accélérés sous une différence de potentiel de 50kV (il s'agit d'électrons relativistes) et dirigés vers un ensemble de trois électrodes. Une électrode centrale cylindrique, de diamètre inférieur au micromètre, est portée à un potentiel de 10 V supérieur à celui de deux électrodes planes latérales reliées à la Terre. La distance entre les deux électrodes latérales est de 10mm. Le champ électrique créé par les électrodes dévie les électrons qui passent dans le dispositif. Le faisceau d'électrons incident est divisé en deux faisceaux qui se recouvrent à la sortie du dispositif.



(a)=8 électrons détectés, (b)=270, (c)=2000, (d)=60000

La détection des électrons est réalisée dans un plan situé dans la zone de recouvrement des deux faisceaux déviés. Sur la figure ci-dessus, on constate qu'une figure d'interférences se construit progressivement au fur et à mesure que les électrons s'accumulent dans le plan de détection.

Comme dans l'expérience d'optique équivalente, la distribution des points d'impact des électrons sur le détecteur suit une loi statistique particulière. L'observation de la figure d'interférence ne donne aucune information sur la trajectoire suivie par chaque électron. La notion de trajectoire des électrons n'a donc pas de sens dans l'expérience réalisée. Si l'on souhaite déterminer par quelle voie passe chaque électron, on doit réaliser une autre expérience en plaçant par exemple deux détecteurs à la sortie du dispositif, dans le prolongement des deux faisceaux déviés. Mais alors, la figure d'interférence n'est plus observable.

I-3) Principe de complémentarité

En 1927 Bohr énonça le principe de complémentarité :

Il n'existe pas de description classique cohérente, en termes d'onde ou de particule, permettant d'interpréter l'ensemble des phénomènes observés.

La mécanique quantique a été élaborée de façon à donner une description unique et précise de tous les phénomènes observés, qu'il s'agisse de la lumière ou de la matière. La probabilité de détecter un photon ou une particule matérielle en un point donné suit une loi qui est déterminée par l'onde elle-même.

II – La fonction d'onde

II-1) Description de l'état d'une particule

La description de l'état dynamique d'une particule quantique, de masse m , à un instant t dans un référentiel R , se fait au moyen d'une fonction d'onde $\Psi(M,t)$ à valeurs complexes. La probabilité de présence de la particule, à l'instant t , dans un volume mésoscopique $d\tau$ centré au point M est donnée par la relation :

$$dP(M, t) = |\Psi(M, t)|^2 d\tau$$

On se limitera, dans ce cours, à des problèmes unidimensionnels d'où :

$$dP(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 dx \text{ où } \begin{cases} \Psi(x, t) : \textit{amplitude de probabilité} \\ |\Psi(x, t)|^2 : \textit{densité linéique} \\ \textit{de probabilité ou densité de} \\ \textit{probabilité de présence} \end{cases}$$

II-2) Normalisation de la fonction d'onde

La densité de probabilité de présence est une quantité accessible à la mesure, comme on le verra dans le paragraphe suivant, et possède donc une réalité physique.

Notons D le domaine de l'espace accessible à la particule. Celle-ci se trouve certainement dans le domaine D . Cela se traduit

mathématiquement par la relation de normalisation suivante :

Condition de normalisation :

$$\iiint_D |\Psi(M, t)|^2 d\tau = 1 \text{ ou } \int_D |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

Si tout l'espace est accessible on aura donc :

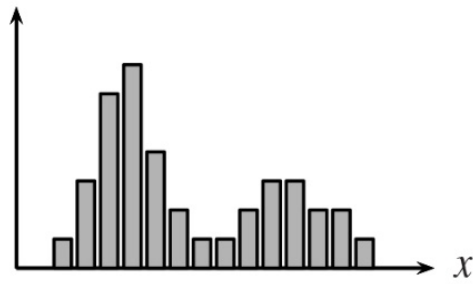
$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

II-3) Interprétation probabiliste

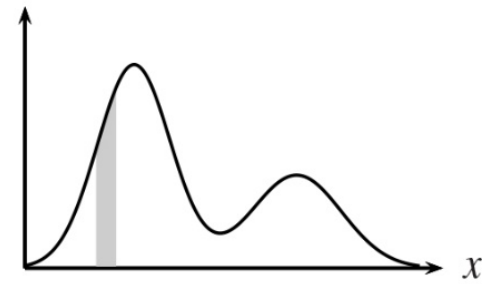
L'interprétation de la fonction d'onde en termes de probabilité est due à Max Born. La probabilité de présence $dP(M, t)$ représente la probabilité que la particule quantique puisse être détectée au voisinage du point M par une mesure réalisée à l'instant t .

Pour mesurer la densité de probabilité de présence, il faudrait pouvoir répéter, à un même instant t , un nombre important de mesures indépendantes de la position de la particule quantique et dresser un histogramme des valeurs obtenues. Il est équivalent de considérer N particules quantiques identiques, indépendantes, toutes dans le même état représenté par la fonction d'onde $\Psi(M, t)$. À un instant t donné, on mesure la position des N particules. On obtient une représentation de la distribution des particules dans l'espace, comme l'illustre la figure.

Nombre de mesures



(a)

 $|\psi(x,t)|^2$ 

(b)

- (a) Exemple de distribution des positions de N particules quantiques identiques. La hauteur cumulée des barres de l'histogramme est égale au nombre N de particules
- (b) Densité de probabilité de présence correspondante. L'aire colorée correspond à la probabilité de présence $dP(x,t)$.

La distribution des positions des N particules donne accès à la probabilité de présence d'une particule. La position d'une particule quantique n'est pas certaine : la particule est a priori délocalisée dans tout l'espace accessible. Il en résulte que parler de la valeur instantanée de la position de la particule n'a pas de sens. On peut seulement déterminer la probabilité qu'une mesure de cette grandeur à un instant fixé donne telle ou telle valeur. Il en est de même pour la quantité de mouvement de la particule.

II-4) Orbitale

En chimie, la fonction d'onde est appelée orbitale et correspond à l'amplitude de probabilité de présence des électrons de l'atome ou de la molécule.

Par exemple pour les hydrogénoïdes :

$$\Psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-Z \frac{r}{a_0}}$$

Où a_0 est le rayon de bohr de 52,9 pm et Z le nombre de protons.

II-5) L'équation de Schrödinger

a) Postulat

Pour une particule soumise à un potentiel $V(M,t)$, l'évolution de la fonction d'onde se traduit par l'équation de Schrödinger :

- A 3 dimensions :

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

- A 1 dimension suivant (Ox) :

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

\hbar est la constante de Planck réduite :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{Js}$$

Cette équation est du premier ordre par rapport à la variable temporelle. Ainsi, si la fonction d'onde est complètement connue à un instant initial t_0 , elle le sera à tout instant ultérieur. L'état de la particule quantique pourra alors être complètement déterminé à tout instant à partir d'un état initial connu.

b) Principe de superposition

Comme l'équation de Schrödinger est linéaire, on peut superposer des solutions pour construire d'autres solutions.

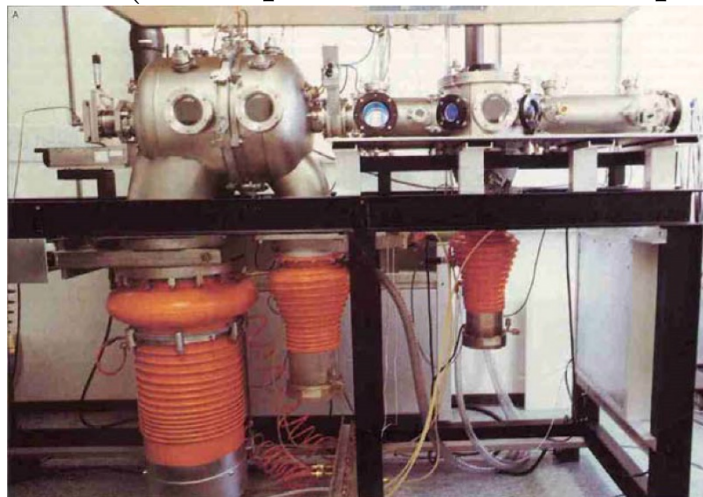
Ainsi, si $\Psi_1(x,t)$ et $\Psi_2(x,t)$ sont deux solutions, alors $\alpha_1 \Psi_1(x,t) + \alpha_2 \Psi_2(x,t)$ où $\alpha_1 \in \mathbb{R}, \alpha_2 \in \mathbb{R}$ est aussi une solution.

II-6) Interférences quantiques

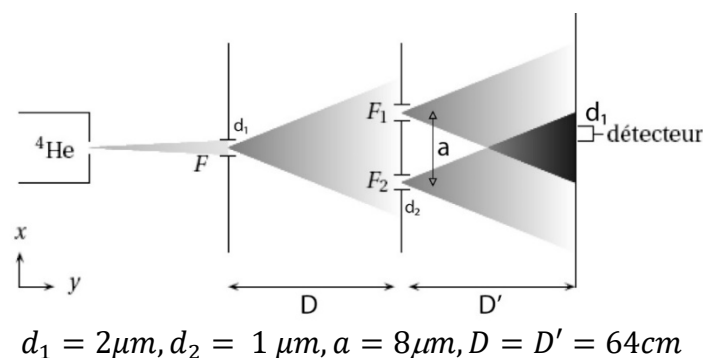
a) Expérience de Carnal/Mlynek

Prenons l'exemple d'une expérience d'interférométrie atomique réalisée par O. Carnal et J.Mlynek, de l'université de Constance en Allemagne en 1991. Ces deux physiciens utilisent un montage expérimental, analogue au dispositif optique des deux fentes d'Young. Les particules utilisées sont des atomes d'hélium : ils ont une masse faible, ce qui donne une grande longueur d'onde de de Broglie. La vitesse des atomes d'hélium peut être ajustée en modifiant la température du réservoir : les longueurs d'onde de De Broglie utilisées pour réaliser l'expérience sont :

- $\lambda = 0,56 \cdot 10^{-10} m$ (correspondant à une température de 295 K)
- $\lambda = 1,03 \cdot 10^{-10} m$ (correspondant à une température de 83 K).



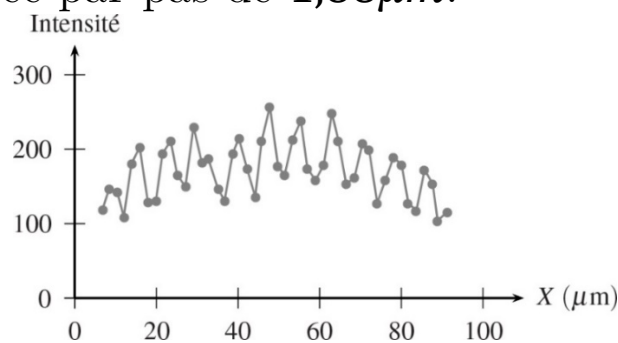
La source atomique est située à gauche et la détection se fait à l'extrémité droite du tube supérieur. Les dispositifs de couleur orange sont des pompes à diffusion permettant d'obtenir un très bon vide dans l'enceinte.



Le flux d'atomes à la sortie du réservoir est d'environ 10^{22} atomes par seconde et par mètre carré. Une fois sortis du réservoir, les atomes passent à travers une première fente, de largeur $d_1 = 2\mu m$ pratiquée dans une feuille d'or.

La hauteur de la fente est de 4mm. Après un trajet d'une longueur $D = 64$ cm, les atomes passent à travers un dispositif de deux fentes, de largeur $d_2 = 1\mu m$, distantes de $a = 8\mu m$. Ces deux fentes, découpées dans une feuille d'or, font 2 mm de haut. Le parallélisme des deux fentes est ajusté de sorte que l'angle entre deux côtés parallèles des deux fentes est inférieur à 10^{-4} rad. Le parallélisme des fentes F, F_1 et F_2 est ajusté avec un angle résiduel inférieur à 5.10^{-4} rad. Afin de limiter les collisions avec d'autres particules gazeuses, l'expérience est réalisée sous une pression réduite de $5 \times 10^{-5} Pa$.

Après le passage par les fentes F_1 et F_2 , la distribution des atomes est mesurée dans un plan situé à une distance $D' = 64$ cm derrière le plan des deux fentes. Ces impacts sont localisés par un détecteur dont la partie sensible est une fente d'une largeur de $2\mu m$, pouvant être décalée par pas de $1,88\mu m$.



Un exemple de résultat expérimental est présenté sur la figure, qui révèle des franges d'interférence. La mesure de l'interfrange donne :

$$i_{exp} = 7,7 \pm 0,5 \mu m$$

qui est compatible avec la valeur théorique :

$$i_{théo} = \frac{\lambda D}{a} = 8,4 \mu m$$

L'affaiblissement du signal du côté droit de la figure est lié à la largeur finie des fentes (effet de la diffraction). La tache centrale de la figure de diffraction a une largeur de l'ordre de :

$$\Delta X_{diff} = \frac{2\lambda D}{d_2} = 132 \mu m$$

Enfin, on remarquera que la tache centrale de diffraction produite par la première fente F a une largeur égale à :

$$\Delta X_{diff} = \frac{2\lambda D}{d_1} = 66 \mu m$$

ce qui permet d'« éclairer » les deux fentes F1 et F2 de façon cohérente avec la même onde.

b) Interprétation

La linéarité de l'équation de Schrödinger permet d'interpréter les résultats des expériences d'interférences atomiques. En notant $\Psi(x, t)$ la fonction d'onde des atomes en un point x de l'écran dans le cas où les deux fentes sont ouvertes, cette fonction d'onde est la superposition des fonctions d'onde $\Psi_1(x, t)$ et $\Psi_2(x, t)$ correspondant respectivement au cas où seule la fente 1 ou 2 est ouverte. La fonction d'onde des atomes en un point de l'écran s'écrit :

$$\Psi(x, t) = \alpha(\Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t))$$

avec α un coefficient de normalisation de la fonction d'onde $\Psi(x, t)$. La quantité mesurée lors de l'expérience est le nombre d'atomes arrivant au voisinage d'un point de l'écran, ce qui est lié à la densité linéique de probabilité de présence d'un atome en un point de l'écran donnée par $|\Psi(x, t)|^2$. Le module carré de la fonction d'onde s'écrit :

$$|\Psi(x, t)|^2 = |\alpha(\Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t))|^2$$

$$\Leftrightarrow |\Psi(x, t)|^2 = |\alpha|^2(|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \Psi_1 \Psi_2^* + \Psi_1^* \Psi_2)$$

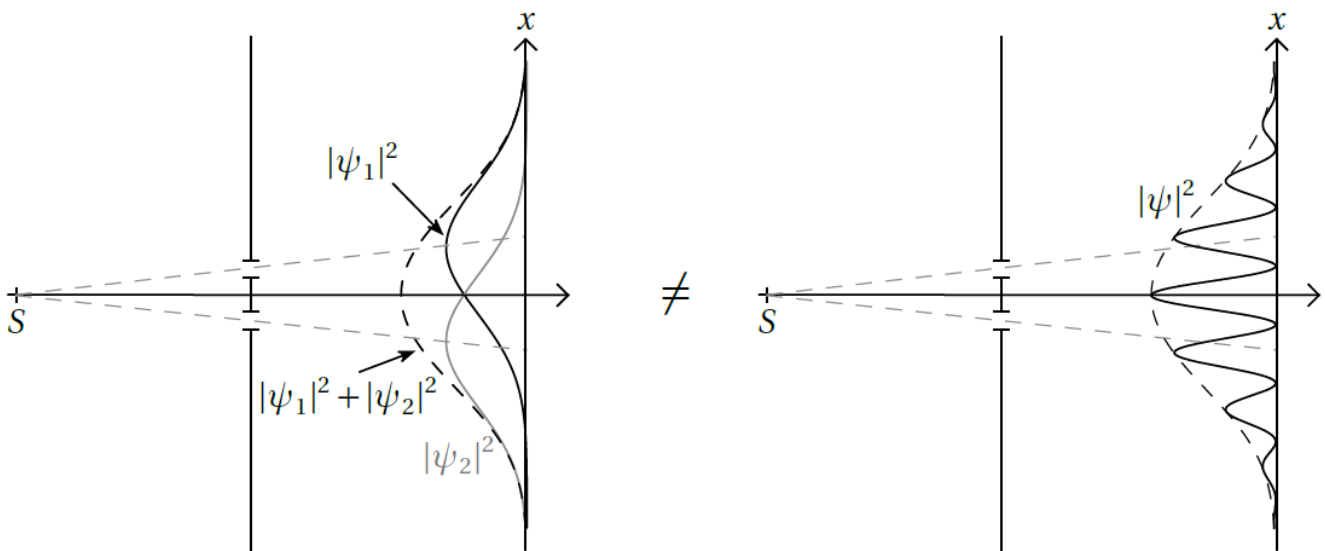
$$\Leftrightarrow |\Psi(x, t)|^2 = |\alpha|^2 (|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \Psi_1 \Psi_2^* + (\Psi_1 \Psi_2^*)^*)$$

$$\Leftrightarrow |\Psi(x, t)|^2 = |\alpha|^2 (|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + 2\text{Re}(\Psi_1 \Psi_2^*))$$

$|\Psi_1(x, t)|^2$ et $|\Psi_2(x, t)|^2$ représentent respectivement les densités de probabilité de présence des atomes au point x de l'écran dans le cas où seule la fente 1 ou 2 est ouverte. On remarque que :

$$|\Psi(x, t)|^2 \neq |\alpha|^2 (|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2)$$

ce qui explique que la distribution des nombres de comptage observée sur l'écran diffère de la somme des résultats obtenus dans les cas où une fente puis l'autre serait ouverte. Le terme croisé est similaire à ce qui a été étudié en optique ondulatoire et correspond à un terme d'interférences entre les fonctions d'ondes $\Psi_1(x, t)$ et $\Psi_2(x, t)$ responsable de la figure observée sur l'écran.



II-7) Etats stationnaires de l'équation de Schrödinger

a) Etat stationnaire en mécanique quantique

On appelle état stationnaire un état du système caractérisé par :

- $V(x,t)=V(x)$
- une fonction d'onde factorisée sous la forme :

$$\Psi(x, t) = \varphi(x)f(t)$$

où φ et f sont a priori deux fonctions à valeurs complexes.

On prendra garde au sens différent que prend le mot stationnaire en mécanique quantique et en physique ondulatoire classique, où une onde stationnaire correspond à une forme factorisée sous la forme d'un produit d'une fonction réelle de l'espace et d'une fonction réelle du temps.

b) Equation de Schrödinger indépendante du temps

Ecrivons la condition de normalisation de la fonction d'onde :

$$\int_D |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \Leftrightarrow |f(t)|^2 \int_D |\varphi(x)|^2 dx = 1$$

$$\Rightarrow |f(t)| = cste$$

On peut tout à fait choisir $|f(t)| = 1$ et faire « rentrer » la constante dans $\varphi(x)$. Cela impose à la fonction $\varphi(x)$ d'être normalisée comme suit :

$$\int_D |\varphi(x)|^2 dx = 1$$

On peut donc écrire la fonction d'onde sous la forme suivante :

$$\Psi(x, t) = \varphi(x)e^{i\alpha(t)}$$

où $\alpha(t)$ est une fonction du temps, indéterminée pour le moment.

La densité de probabilité de présence associée à un état stationnaire est indépendante du temps.

$$|\Psi(x, t)|^2 = |\varphi(x)|^2$$

On injecte la fonction d'onde dans l'équation de Schrödinger :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial(\varphi(x)e^{i\alpha(t)})}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2(\varphi(x)e^{i\alpha(t)})}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x)e^{i\alpha(t)} \\ \Leftrightarrow -\hbar\varphi(x) \frac{\partial\alpha(t)}{\partial t} e^{i\alpha(t)} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} e^{i\alpha(t)} + V(x)\varphi(x)e^{i\alpha(t)} \\ \Leftrightarrow -\hbar \frac{\partial\alpha(t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\varphi(x)}{\varphi(x) \partial x^2} + V(x) \text{ car } \varphi(x)e^{i\alpha(t)} \neq 0 \\ \Leftrightarrow -\hbar\dot{\alpha}(t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ddot{\varphi}(x)}{\varphi(x)} + \underbrace{V(x)}_{\text{énergie}} \end{aligned}$$

Comme le membre de droite de cette équation est indépendant du temps, il en résulte que $\dot{\alpha}(t)$ est une constante indépendante du temps, homogène à une pulsation.

Posons $\dot{\alpha}(t) = -\omega$. Le produit $\hbar\omega$ est homogène à une énergie. Aussi, on pose $E = \hbar\omega$. Nous verrons ultérieurement que E représente l'énergie totale de la particule quantique.

L'équation ci-dessus prend alors la forme suivante, connue sous le nom d'équation de Schrödinger indépendante du temps :

Equation de Schrödinger indépendante du temps:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x) = E \varphi(x)$$

c) Fonction d'onde dans un état stationnaire

Soit :

$$\begin{cases} \Psi(x, t) = \varphi(x)e^{i\alpha(t)} \\ \dot{\alpha}(t) = -\omega \end{cases}$$

Par conséquent :

$$\Psi(x, t) = \varphi(x)e^{-i\omega t}$$

La fonction d'onde dans un état stationnaire peut s'écrire :

$$\Psi(x, t) = \varphi(x)e^{-i\omega t} = \varphi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

d) Propriétés de $\varphi(x)$

i- La fonction $\varphi(x)$ ne peut prendre qu'une seule valeur à l'abscisse x .

ii- La fonction $\varphi(x)$ est normalisée : $\int_D |\varphi(x)|^2 dx = 1$. Cette condition interdit à $\varphi(x)$ de diverger.

iii- La fonction $\varphi(x)$ est continue.

iv- La fonction dérivée $\frac{d\varphi(x)}{dx}$ est continue en tout point où l'énergie potentielle $V(x)$ est continue ou ne présente pas de discontinuité d'amplitude infinie

Il se trouve que, dans de nombreux cas, les solutions physiquement acceptables qui vérifient ces conditions ne correspondent qu'à certaines valeurs discrètes de l'énergie E . C'est là qu'apparaît la quantification de l'énergie.

III – Équation de Schrödinger pour une particule libre

III-1) Définition

On appelle particule quantique libre, une particule quantique évoluant dans le vide sans interaction :

$$V(x) = 0$$

Dans le référentiel R, la quantité de mouvement de la particule quantique est notée \vec{p} et son énergie mécanique E se confond avec son énergie cinétique.

L'évolution de la fonction d'onde d'une particule quantique libre est donc donnée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}$$

La particule quantique libre peut se déplacer de $-\infty$ à $+\infty$.

III-2) Etats stationnaires

a) Fonction d'onde

Comme précédemment, nous recherchons une solution où la fonction d'onde est factorisée sous la forme d'un produit d'une fonction de t et d'une fonction de x. Nous savons que cette fonction d'onde peut se mettre sous la forme :

$$\Psi(x, t) = \varphi(x)e^{-i\omega t} = \varphi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

où $\varphi(x)$ est solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} &= E \varphi(x) = \hbar\omega \varphi(x) \\ \Leftrightarrow \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) &= 0 \end{aligned}$$

- Cas où $E < 0$:

Dans ce cas, la forme générale de la solution de l'équation s'écrit :

$$\varphi(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx} \text{ où } k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Donc : $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} |\varphi(x)|^2 = +\infty$

Cette solution n'est pas acceptable. On a donc nécessairement :

$$A = B = 0 \Rightarrow \Psi(x, t) = 0$$

- Cas où $E = 0$:

Dans ce cas, la forme générale de la solution de l'équation s'écrit :

$$\varphi(x) = Ax + B$$

Pour que $|\varphi(x)|^2$ ne diverge pas on doit avoir $A=0$.

Or :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1 \Leftrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} B^2 dx = 1$$

N'est pas vérifié donc :

$$A = B = 0 \Rightarrow \Psi(x, t) = 0$$

- Cas où $E > 0$:

- Dans ce cas, la forme générale de la solution de l'équation s'écrit :

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \text{ où } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

L'expression complète de la fonction d'onde est la suivante :

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{-i(kx + \omega t)}$$

On reconnaît là l'expression de la superposition d'une onde

plane harmonique progressant dans le sens des x croissants et d'une onde plane harmonique progressant dans le sens des x décroissants.

b) Convention d'écriture

La résolution de l'équation de Schrödinger pour une particule quantique libre a conduit à ne retenir que la solution où $E > 0$ et $\omega > 0$.

Vu nos notations, la partie temporelle de la fonction d'onde s'écrit alors nécessairement sous la forme :

$$\Psi(x, t) = \varphi(x)e^{-i\omega t} = \varphi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \text{ où } \omega > 0$$

En mécanique quantique, on convient de toujours écrire la dépendance temporelle d'une fonction d'onde harmonique sous la forme :

$$\Psi(x, t) = \varphi(x)e^{-i\omega t} = \varphi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \text{ où } \omega > 0$$

c) Relation de dispersion

Soit :

$$\begin{cases} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0 \\ \varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \end{cases}$$

D'où :

$$\begin{aligned} -k^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} &= 0 \\ \Leftrightarrow E &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\Leftrightarrow \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

La vitesse de phase de l'onde plane progressive harmonique peut être déduite de la relation de dispersion :

$$v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$$

La vitesse de groupe est définie par :

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

Or :

$$d\omega = \frac{\hbar 2k dk}{2m}$$

$$\Rightarrow v_g = \frac{\hbar k}{m} = 2v_\varphi$$

La vitesse de phase dépend de k : la propagation d'une onde libre est dispersive.

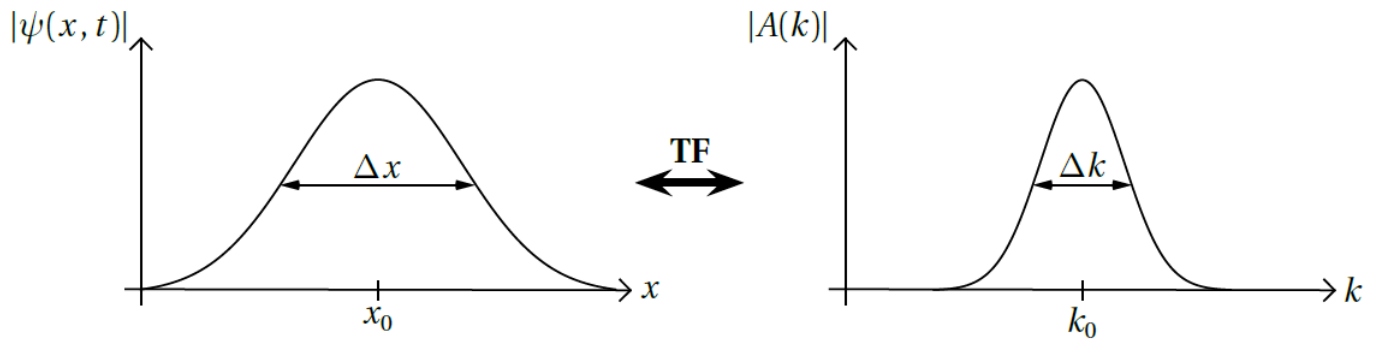
III-3) Inégalités de Heisenberg

a) Paquet d'ondes

La description de l'état d'une particule libre nécessite l'utilisation d'un paquet d'ondes. La fonction d'onde d'une particule libre est alors une superposition d'ondes planes monochromatiques :

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

L'expression du paquet d'ondes montre qu'il existe une relation de transformée de Fourier entre $\psi(x, t)$ et $A(k)$.



Une des propriétés de la transformée de Fourier est d'imposer une relation entre les dispersions des deux variables conjuguées qui sont dans notre cas x et k . En notant :

$$\begin{cases} \Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \\ \Delta k = \sqrt{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2} \end{cases}$$

les dispersions (ou indéterminations) sur x et k , on obtient :

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$$

b) Inégalité d'Heisenberg spatiale

En 1927 Heisenberg a établi qu'il existe une valeur minimale pour le produit des indéterminations sur la position et sur la quantité de mouvement selon (Ox) : $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$

Cette inégalité est connue sous le nom d'inégalité de Heisenberg spatiale. Elle s'applique quelle que soit la fonction d'onde décrivant le système.

Vu que $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, peut aussi écrire : $\Delta x \Delta k_x \geq \frac{1}{2}$

Inégalité d'Heisenberg spatiale :

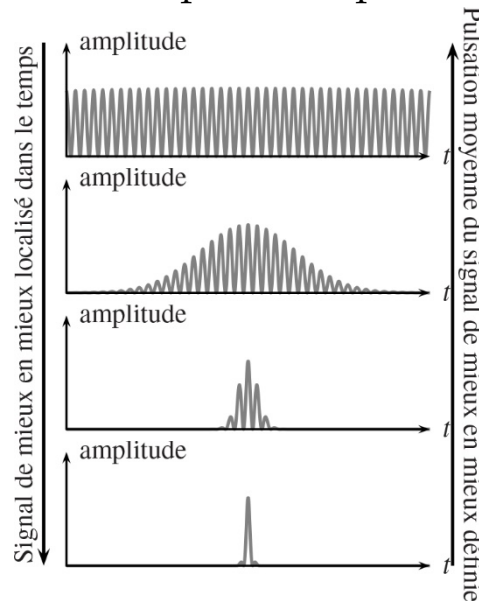
$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \text{ ou } \Delta x \Delta k_x \geq \frac{1}{2}$$

On ne peut pas attribuer simultanément à une particule

quantique une position rigoureusement précise et une quantité de mouvement rigoureusement précise. Il existe une limitation intrinsèque à la définition simultanée de la position et de la quantité de mouvement.

c) Inégalité temporelle

Considérons les signaux temporels représentés sur la figure.



On constate que la pulsation moyenne d'un signal est d'autant mieux définie que sa durée est importante. Autrement dit, l'indétermination sur la pulsation, notée $\Delta\omega$, diminue lorsque la durée du signal, notée Δt , augmente.

On admettra que l'on vérifie :

$$\Delta\omega\Delta t \geq \frac{1}{2}$$

En utilisant la relation $E = \hbar\omega$, on obtient l'inégalité temps-énergie.

Inégalité Energie temps :

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \text{ ou } \Delta E \tau \geq \frac{\hbar}{2}$$

Cette relation est similaire à l'inégalité de Heisenberg, mais elle

n'a pas le même statut, car Δt désigne une durée caractéristique d'évolution et non une dispersion statistique autour d'une valeur moyenne (le temps t échappe à toute quantification, à la différence de la position, de la quantité de mouvement ou de l'énergie).

Un état stationnaire est caractérisé par une densité de probabilité indépendante du temps. Un tel état, invariant dans le temps, peut être caractérisé par un temps caractéristique d'évolution infini : $\tau \rightarrow \infty$. Il en résulte que $\Delta E \rightarrow 0$.

Pour un état stationnaire :

$$\tau \rightarrow \infty \text{ et } \Delta E \rightarrow 0$$

III-4) Représentation par paquet d'ondes

a) Sens physique de l'OPPH

Nous venons de voir que les états stationnaires d'une particule quantique libre sont des ondes planes progressives harmoniques. Une onde plane progressive harmonique, de la forme :

$$\psi(x, t) = Ae^{i(\omega t - kx)}$$

correspond à une probabilité de présence uniforme $|A|^2$ dans tout l'espace. Une telle fonction d'onde ne peut pas être normalisée. Elle n'a donc, en toute rigueur, pas de réalité physique.

Pour résoudre ce problème on va, une nouvelle fois, utiliser la notion de paquets d'ondes, qui pourra être normalisé correctement.

b) Structure en paquet d'ondes

Nous allons donc envisager la propagation d'une superposition d'ondes harmoniques de pulsations et de vecteurs d'onde proches des valeurs ω_0 et k_0 liées par la relation de dispersion :

$$\omega_0 = \frac{\hbar k_0^2}{2m}$$

Plus précisément, on superpose N ondes harmoniques, avec $N \gg 1$. Leurs vecteurs d'onde sont supposés régulièrement distribués dans l'intervalle $[k_1; k_2]$.

On pose :

$$\begin{cases} \Delta k = k_2 - k_1 \\ k_0 = \frac{k_1 + k_2}{2} \end{cases}$$

On fait l'hypothèse que $\Delta k \ll k_0$. Cette approximation définit un paquet d'ondes quasi monochromatique.

Pour former le paquet d'ondes, on choisit d'ajouter des composantes de même amplitude :

$$\psi_n(x, t) = Ae^{i(k_n x - \omega_n t)}$$

où $\begin{cases} \omega_n = \frac{\hbar k_n^2}{2m} \\ k_n = k_1 + \Delta k \frac{n-1}{N-1} \end{cases}$

En mettant en facteur l'onde de pulsation et de vecteur d'onde moyens, on arrive à :

$$\psi_n(x, t) = Ae^{i(k_0 x - \omega_0 t)} e^{i((k_n - k_0)x - (\omega_n - \omega_0)t)}$$

Posons :

$$\begin{cases} \delta k_n = k_n - k_0 \\ \delta \omega_n = \omega_n - \omega_0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \psi_n(x, t) = Ae^{i(k_0 x - \omega_0 t)} e^{i(\delta k_n x - \delta \omega_n t)}$$

D'où : $\omega_n = \frac{\hbar k_n^2}{2m}$ donne :

$$\begin{aligned} \omega_0 + \delta \omega_n &= \frac{\hbar(k_0 + \delta k_n)^2}{2m} \\ \Rightarrow \omega_0 + \delta \omega_n &= \frac{\hbar k_0^2}{2m} + \frac{\hbar k_0}{m} \delta k_n + \frac{\hbar \delta k_n^2}{2m} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \delta\omega_n \sim \frac{\hbar k_0}{m} \delta k_n \text{ car } \delta k_n \ll k_0$$

$$\text{D'où la vitesse de groupe : } v_g = \frac{\delta\omega_n}{\delta k_n} = \frac{\hbar k_0}{m}$$

La fonction d'onde obtenue par superposition des N ondes harmoniques s'écrit :

$$\Psi(x, t) = A e^{ik_0(x-v_\phi t)} \sum_{i=1}^N e^{i\delta k_n(x-v_g t)} \text{ où } v_g = \frac{\hbar k_0}{m}$$

La densité de probabilité de présence s'en déduit :

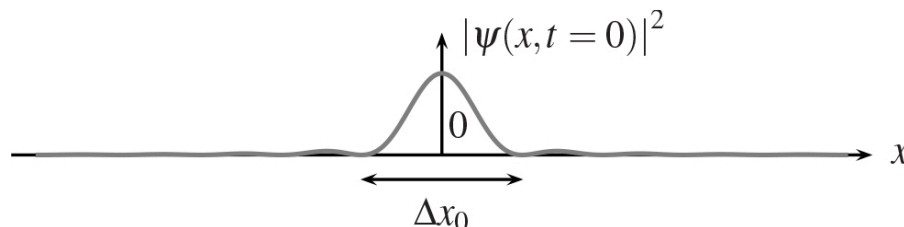
$$|\psi(x, t)|^2 = |A|^2 \left| \sum_{i=1}^N e^{i\delta k_n(x-v_g t)} \right|^2$$

c) Structure initiale

À l'instant initial $t = 0$, la densité de probabilité s'écrit :

$$|\psi(x, 0)|^2 = |A|^2 \left| \sum_{i=1}^N e^{i\delta k_n x} \right|^2$$

La figure représente le graphe de $|\psi(x, 0)|^2$ en fonction de x , et appelle plusieurs commentaires.



Représentation de la densité de probabilité initiale pour $N=100$.

Dans l'expression de $|\psi(x, 0)|^2$, la somme correspond à un terme d'interférences à N ondes. Chaque composante y est caractérisée par une phase égale à $\delta k_n x$.

- Pour $x = 0$, on constate que toutes ces ondes s'ajoutent en phase (interférences totalement constructives). La densité de

probabilité est alors maximale.

- Sur le graphe, on constate que la densité de probabilité de présence prend des valeurs non nulles essentiellement au voisinage de $x = 0$ et reste très faible au-delà.

Utilisons la notation de Fresnel pour illustrer ce phénomène. L'angle entre deux vecteurs associés à deux termes consécutifs de la somme est égal à :

$$\delta\varphi = \delta k_{n+1}x - \delta k_n x = (k_{n+1} - k_n)x$$

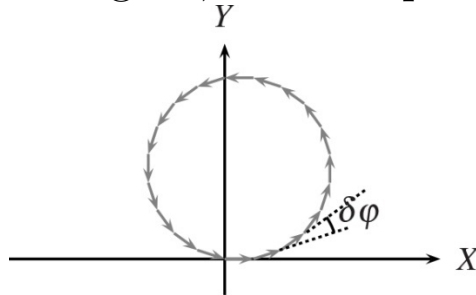
Or :

$$k_n = k_1 + \Delta k \frac{n-1}{N-1}$$

$$\Rightarrow \delta\varphi = \left(k_1 + \Delta k \frac{n}{N-1} - \left(k_1 + \Delta k \frac{n-1}{N-1} \right) \right) x$$

$$\Rightarrow \delta\varphi = \Delta k \frac{x}{N-1}$$

Pour certaines valeurs de x , la somme de tous ces vecteurs peut être nulle. Comme l'illustre la figure, il suffit que : $N\delta\varphi = 2p\pi$.



On peut déterminer les abscisses où le vecteur résultant, et donc la probabilité de présence, s'annule :

$$N\delta\varphi = 2p\pi \Leftrightarrow \Delta k \frac{Nx}{N-1} = 2p\pi$$

Vu que N est grand :

$$x = \frac{2p\pi}{\Delta k}$$

On peut en déduire la largeur de l'intervalle où la probabilité de présence prend des valeurs non nulles de part et d'autre du maximum :

$$\Delta x = \frac{4\pi}{\Delta k}$$

À l'intérieur de cet intervalle, l'interférence des N ondes est suffisamment constructive pour donner une valeur non nulle à la densité de probabilité de présence.

La relation précédente peut être écrite sous la forme :

$$\Delta x \Delta k = 4\pi$$

Elle est compatible avec l'inégalité de Heisenberg spatiale qui impose

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$$

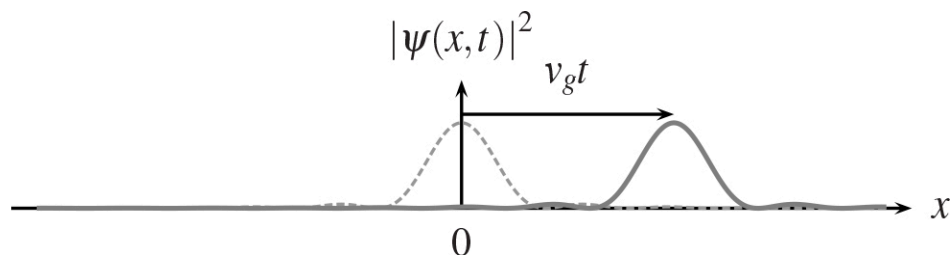
d) Structure à un instant t

On considère maintenant l'expression :

La densité de probabilité de présence s'en déduit :

$$|\psi(x, t)|^2 = |A|^2 \left| \sum_{i=1}^N e^{i\delta k_n(x - v_g t)} \right|^2$$

Par comparaison avec l'état initial, on peut remarquer que le maximum de densité de probabilité se situe maintenant à l'abscisse $x = v_g t$.



Représentation de la densité de probabilité à un instant $t > 0$ (trait plein) pour $N=100$.

En toute rigueur, si l'on reprend l'expression complète sans négliger le second terme, on constate que le paquet d'ondes s'étale au cours de sa propagation. Cet effet est lié à la dispersion de la vitesse de groupe.

e) Quantité de mouvement moyenne

Le vecteur d'onde moyen \vec{k} du paquet d'ondes correspond à une longueur d'onde de De Broglie moyenne $\lambda = \frac{2\pi}{k}$. Pour faire le lien entre la propagation du paquet d'ondes et la description particulière, on utilise la relation de de Broglie en associant une quantité de mouvement moyenne \vec{p} à la longueur d'onde λ tel que :

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} = m \vec{v}_g$$

On identifie la vitesse de déplacement de la particule quantique à la vitesse de groupe du paquet d'ondes.

Or d'après la relation de dispersion :

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

On retrouve le fait que l'énergie totale s'assimile à l'énergie cinétique de la particule. Par conséquent l'équation de Schrödinger traduit une conservation énergétique d'une particule quantique.

On peut représenter une particule quantique par un paquet d'ondes quasi-monochromatique de vecteur d'onde moyen \vec{k} et de pulsation moyenne ω telle que :

$$\begin{cases} \vec{p} = \hbar \vec{k} = m \vec{v}_g \\ E = \hbar \omega \end{cases}$$

III-5) Courant de probabilité

La probabilité de présence, à l'instant t , d'une particule quantique entre les abscisses x et $x+dx$ est donnée par la relation :

$$dP = |\psi(x, t)|^2 dx$$

Cette particule quantique peut être représentée par un paquet d'ondes, de vecteur d'onde moyen \vec{k} , qui se déplace à la vitesse de groupe de norme $v_g = \hbar \frac{k}{m}$.

Le paquet d'ondes parcourt donc la distance dx pendant la durée dt d'où :

$$dP = |\psi(x, t)|^2 dx = |\psi(x, t)|^2 v_g dt = |\psi(x, t)|^2 \hbar \frac{k}{m} dt$$

On peut considérer que cette relation met en évidence un « débit » de probabilité de présence à l'abscisse x à travers une surface unité tel que :

$$\frac{dP}{dt} = |\psi(x, t)|^2 \hbar \frac{k}{m}$$

que l'on peut exprimer au moyen d'un vecteur densité de courant de probabilité \vec{j} .

La probabilité de présence qui « s'écoule » à travers une abscisse x pendant une durée dt est :

$$dP = \underbrace{\vec{j}(x, t)}_{s^{-1}} \cdot u_x dt \quad \text{où} \quad \vec{j}(x, t) = |\psi(x, t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$$

Or on rappelle que :

$$\begin{aligned} dP &= |\psi(x, t)|^2 dx \\ \Leftrightarrow \frac{dP}{dx} &= |\psi(x, t)|^2 = \rho(x, t) \end{aligned}$$

Cette grandeur $\rho(x, t)$ est appelée densité linéique de probabilité.

Par analogie avec la conduction électrique ($\vec{j} = \rho\vec{v}$), on définit le courant de probabilité par :

$$\underbrace{\vec{j}(x, t)}_{s^{-1}} = \underbrace{\rho(x, t)}_{m^{-1}} \underbrace{\vec{v}_g}_{m s^{-1}}$$

Le vecteur densité de courant de probabilité \vec{j} peut s'écrire :

$$\underbrace{\vec{j}(x, t)}_{s^{-1}} = \underbrace{\rho(x, t)}_{m^{-1}} \underbrace{\vec{v}_g}_{m s^{-1}} = \text{densité} \times \text{vitesse}$$