

Od 5

Approche ondulatoire de la mécanique quantique

Intro : - MQ au cœur de très nombreuses technologies actuelles (microprocesseurs, mémoires, microscopie à effet tunnel, lasers, IRM, ...) et sans doute futures (ordinateurs quantiques ...)

- développée au début du 20^{ème} siècle par Planck, Einstein, de Broglie, Dirac, Schrödinger, Heisenberg, Pauli ...

- quelle est la $\pm$ se fonda entre la description de la matière en méca classique et en méca quantique ?
- quelle est l'équation qui gouverne l'évolution d'une particule quantique ?
- Comment modéliser des phénomènes quantiques de manière simple (première approche) pour percevoir leur caractère parfois contre-intuitif et leurs applications ?
(du pt de vue classique)

II/ Dualité onde - corpuscule

1) Aspect expérimental

cf cours de 1^{ère} année.

montre vidéo interférences (photons / électrons)

2) Bilan

* pour la lumière : relation de Planck - Einstein :

$$E = h \cdot \nu$$

$\downarrow$ $\quad \quad \quad \swarrow \searrow$
 J $\quad \quad \quad J.s$ $\rightarrow Hz$

aspect
corpusculaire

aspect ondulatoire

* pour la matière : relation de De Broglie
(à penser "de breuille")

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

$\swarrow \quad \quad \quad \rightarrow$
 $kg \quad m.s^{-1}$ $\quad \quad \quad J.s$ $\rightarrow m$

Dans les deux cas, h est la constante de Planck : $h = 6,63 \cdot 10^{-34} J.s$ (on utilise aussi $\hbar = \frac{h}{2\pi}$).

La dernière relation indique qu'à une particule de matière de quantité de mouvement $p = m \cdot v$ on peut associer une onde de longueur λ tq

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad . \quad \text{C'est cet aspect ondulatoire de}$$

la matière qui est développé ds ce chapitre.

3) Classique ou quantique?

Soit D une distance caractéristique du problème.

Si $\lambda \ll D$: traitement classique
sinon : traitement quantique

Rg: un critère pour utilisation optique géométrique / optique ondulatoire.

Ex: - rayon traversant une porte : $\lambda \sim 10^{-35}$ m
et $D \sim 10^0$ m. $\lambda \ll D$, classique [⊕]

- électron à $\frac{c}{10}$ traversant un cristal :
 $\lambda \sim 2,5 \cdot 10^{-11}$ m et $D \sim 10^{-10}$ m. $\lambda \gtrsim D$,
quantique

⊗ vous ne serez jamais diffracté en traversant une porte...!

II/ Fonction d'onde et équation de Schrödinger

1) Notion de fonction d'onde

ⓐ Le monde est complexe

Les notions de position, vitesse et trajectoire d'une particule de matière n'ont pas de sens en MQ, et on les abandonne au profit de la notion de fonction d'onde (en principe que la notion d'orbitale en chimie; les deux sont directement reliées).

L'état d'une particule quantique est complètement décrit par cette fonction d'onde ψ , dépendant a priori de l'espace et du temps, à valeur de $\mathbb{C} : (\psi)$

$$\mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{C}$$

$$(x, y, z, t) \rightarrow \psi(x, y, z, t)$$

(*) commenta et arger

Rq: on se limitera ds le programme à 1 dimension d'espace : $\psi = \psi(x, t)$.

(b) Interprétation physique / vocabulaire

* La probabilité de présence de la particule à l'instant t , dans un volume infinitésimal $d\tau$ centré en τ s'écrit :

$$dP = |\psi(\tau, t)|^2 \cdot d\tau$$

$\downarrow$
 $m^{-3/2}$



* $\psi(\tau, t)$ s'interprète comme une amplitude de probabilité et $|\psi(\tau, t)|^2$ comme une densité de probabilité ($|\psi(\tau, t)|^2$ élevé $\rightarrow$ forte probabilité de présence ds $d\tau$)

* probabilité de présence ds un volume (V) :

$$P = \iiint_{(V)} dP = \iiint_{(V)} |\psi(\tau, t)|^2 \cdot d\tau$$

* "condition de normalisation" : la probabilité de présence de la particule ds tt l'espace est de 1.

$$\int_{\text{espace}} |\Psi(r, t)|^2 \cdot d\tau = 1$$

entier

(permet de trouver la valeur d'une constante multiplicative de l'expression de Ψ).

montre orbitales atomes d'hydrogène

A retenir, à 1D :

* probabilité de présence $dP = |\Psi(x, t)|^2 \cdot dx$



* amplitude de probabilité : $\Psi(x, t)$

densité (linéique) de probabilité : $\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$

↗ m^{-1}

* condition de normalisation :

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

2) Equation de Schrödinger

ⓐ L'équivalent du PFD pour la quantique

Elle peut se "justifier" théoriquement, mais on la considère comme un postulat de la MQ.

On considère une particule de masse m , dans un réf. donné, en interaction avec un milieu extérieur. Ces interactions se modélisent par une énergie potentielle $E_p(r, t)$ (on utilise par abus de langage en MQ le terme "potentiel" $V(r, t)$ associée à cette particule (rq: à l'échelle micro, ttes les forces

et conservatives!)

Postulat :

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

logiciel multiplicat°
fonction d'onde

A réviser (conseillé) :

Equation de Schrödinger à 1D :

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

avec $\Psi = \Psi(x,t)$ et $V = V(x,t)$ a priori

→ EDP linéaire d'ordre 1 en temps, 2 en espace.

① Principe de superposition

L'équation de S. est linéaire, donc on peut appliquer le principe de superposition :

si Ψ_1 et Ψ_2 sont solutions, alors $\Psi = \alpha \cdot \Psi_1 + \beta \cdot \Psi_2$
($(\alpha, \beta) \in \mathbb{C}^2$) l'est aussi (le vérifier)

Conséquence : $dP_1 = |\Psi_1|^2 \cdot d\tau$ et $dP_2 = |\Psi_2|^2 \cdot d\tau$,
mais $dP = |\Psi|^2 \cdot d\tau$
 $= |\alpha \cdot \Psi_1 + \beta \cdot \Psi_2|^2 \cdot d\tau$
 $\neq dP_1 + dP_2$ a priori !

Il est donc possible de réaliser des interférences d'ondes de matière !

Rq: - cela permet de rendre compte de la figure d'interférences obtenues avec des électrons passant au travers de fentes d'Young
 - c'est le même principe que les interférences étudiées en optique ondulatoire avec les notions d'amplitude de vibration lumineuse " a " et d'éclairement associé " $\mathcal{E}$ ".

3) Equation de Schrödinger indépendante du temps

A 1D pour la suite; et avec un potentiel V indépendant du temps: $V = V(x)$

(a) Etat stationnaire

Def: on appelle état stationnaire d'un système quantique un état pour lequel sa fonction d'onde peut se factoriser sous la forme:

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

où Ψ et f st des fcts à valeurs complexes (a priori).

ou physique des ondes

⚠ en méca classique la def. est #te: les 2 fcts seraient à valeurs réelles.

Ex: $y(x, t) = y_0 \cos(kx) \cdot \cos(\omega t)$

Contre ex: $a(x, t) = A \cdot \cos(\omega t - kn) \rightarrow \underline{a} = A \cdot e^{j\omega t} e^{-jkn}$

mais ce n'est pas une onde stationnaire!

"classique"