

Table des matières

1	Bref historique de la mécanique quantique	1
2	Fonction d'onde et équation de Schrödinger	2
2.1	État d'une particule quantique - Fonction d'onde	2
2.2	Évolution de la fonction d'onde - Équation de Schrödinger	3
2.3	Relations de Planck-Einstein et de de Bröglie.	5
3	Étude d'une particule libre	6
3.1	Solutions stationnaires	6
3.2	Fonction d'onde d'une particule libre	7
3.3	Le paquet d'ondes	8
4	Complément : démonstration de l'inégalité $\Delta x \Delta k_x \geq 1/2$	11

1 Bref historique de la mécanique quantique

Jusqu'au début du XX^{ème} siècle, la physique permettait de décrire correctement deux types de phénomènes : **le comportement des particules matérielles et le rayonnement**. Les particules matérielles sont **localisées**, c'est-à-dire qu'à chaque instant, on peut déterminer précisément leurs positions et leurs vitesses. De plus si on connaît la position et la vitesse initiale d'une particule à un instant, la mécanique newtonienne nous permet de connaître la position et la vitesse de la particule à tout instant. Il s'agit de lois physiques **déterministes**. Les ondes électromagnétiques sont bien différentes car elles **occupent une partie étendue de l'espace** et lorsqu'on tente de limiter l'étendue spatiale d'une onde, celle-ci a tendance à s'étaler : c'est le phénomène de diffraction. Les phénomènes électromagnétiques sont décrits par les équations de Maxwell et la théorie de l'électromagnétisme.

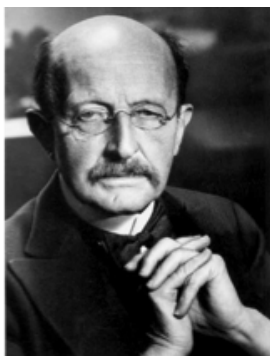
Le début du XX^{ème} siècle fut marqué par deux révolutions qui aboutirent à l'introduction de **la mécanique relativiste et quantique** : les lois de la physique classique cessent d'être valables à des vitesses de l'ordre de grandeur de celle de la lumière (domaine relativiste) ou à l'échelle atomique (domaine quantique). Cependant la physique classique apparaît comme une approximation de ces nouvelles théories valable pour la plupart des phénomènes à l'échelle courante. Dans ce cours, nous n'aborderons pas le domaine relativiste mais nous allons nous concentrer sur le domaine quantique.

Pour comprendre la genèse de cette théorie, revenons sur l'exemple de la lumière. **La nature corpusculaire** de la lumière est une idée ancienne : Newton (1643-1727) considérait déjà la lumière comme un flot de particules (le mot photon ne fut inventé qu'en 1926). Cependant, les expériences d'interférences ou de diffraction ne pouvaient s'expliquer qu'à l'aide d'un **modèle ondulatoire** (travaux de Huygens (1629-1695) puis Fresnel (1788-1827)). Maxwell (1831-1879) formalisa la théorie électromagnétique de la lumière en y intégrant notamment l'optique géométrique (on peut montrer que l'optique géométrique est une approximation de la théorie électromagnétique dans le cadre des « faibles » longueurs d'onde).

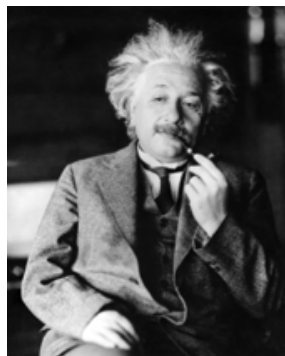
Cependant cette théorie restait impuissante pour expliquer **le rayonnement du corps noir** découvert par Planck en 1900. Einstein résolut le problème en postulant que la lumière était composée de photons d'énergie $h\nu$, ce qui remis au goût du jour l'aspect corpusculaire de la lumière. Dans la théorie de Planck-Einstein, l'interaction d'une onde électromagnétique avec la matière se fait par un processus où le rayonnement apparaît comme constitué de particules : les photons. Ainsi **la lumière peut être décrite de manière équivalente par une onde ou une particule**.

Mais en 1924, **Louis de Bröglie** (prix Nobel en 1929 à 37 ans!) postula que **toute particule matérielle pouvait également être considérée comme une onde**. Cette hypothèse fut vérifiée expérimentalement en 1927 par Davisson et Germer (prix Nobel en 1937) en réalisant une expérience de diffraction avec des électrons. La mécanique quantique était née. Comment traiter la matière? Comme une onde ou comme une particule? Aucune théorie connue ne permettait de concilier ces deux visions. Il fallu une révolution intellectuelle pour permettre de mettre au point une nouvelle théorie et y apporter une réponse : **la mécanique quantique**.

Cette révolution fut notamment menée pas **Heisenberg** (prix Nobel en 1932) **Schrödinger** (prix Nobel en 1933) et **Dirac** (prix Nobel en 1933). Cette théorie, difficile à accepter pour les physiciens, bouleversa totalement notre façon de voir le monde et n'a actuellement jamais été mise en défaut.



Max Planck



Albert Einstein



Louis de Bröglie



Werner Heisenberg



Erwin Schrödinger



Paul Dirac

2 Fonction d'onde et équation de Schrödinger

2.1 État d'une particule quantique - Fonction d'onde

Le passage de la mécanique classique à la mécanique quantique demande de modifier radicalement la notion d'état d'un système physique.

Définition. L'état d'une particule en physique quantique est représenté par sa **fonction d'onde complexe** $\Psi(M, t)$: la **probabilité** que la particule se situe en M au volume dV près à l'instant t vaut $dP = |\Psi(M, t)|^2 dV$. La quantité complexe $\Psi(M, t)$ est l' **amplitude de probabilité** pour la particule d'être en M à t , et $|\Psi(M, t)|^2$ est la **densité de probabilité** pour la particule de se trouver en M à t .

Remarque : Toutes les grandeurs étant complexes, elles se seront pas soulignées comme usuellement.

Propriété. La fonction d'onde est **normalisée** :

$$\forall t \quad \int_{\text{espace}} |\Psi(M, t)|^2 dV = 1 .$$

La probabilité de trouver la particule dans tout l'espace vaut 1.

On en déduit que la dimension de Ψ vaut $L^{-3/2}$.

Remarque : La fonction d'onde n'est qu'une des nombreuses manières d'écrire l'état d'un système quantique, qui de manière générale est représenté par un vecteur d'un espace de Hilbert.

Ainsi, par définition, si l'on souhaite connaître la valeur moyenne sur l'espace d'une grandeur observable A , on a doit calculer

$$\langle A(t) \rangle = \int_{\text{espace}} \Psi(M, t)^* (A(M, t) \Psi(M, t)) dV .$$

🚫🚫🚫 **Attention !** $A(M, t)$ et $\Psi(M, t)$ ne commutent pas forcément !

Remarque : Il s'agit du produit scalaire hermitien $\langle \Psi | A \Psi \rangle$.

Nous étudierons majoritairement des problèmes unidimensionnels. Dans ce cas, la fonction d'onde s'écrira comme dépendant d'une unique variable d'espace, généralement notée x . On étudiera la densité linéique de probabilité de présence $|\Psi(M, t)|^2 dV = |\tilde{\Psi}(x, t)|^2 dx$ où $\tilde{\Psi}(x, t) = \sqrt{S} \Psi(M, t)$ avec S la surface transverse du système étudié. En général, on utilisera directement la notation $\Psi(x, t)$.

Cette notion permet d'expliquer par exemple la localisation des électrons autour d'un atome, décrite par les orbitales pouvant être étudiées en chimie. Ces orbitales sont directement liées à la fonction d'onde. Quelques unes sont représentées figure 1.

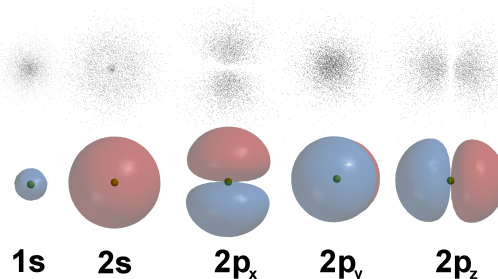


Fig. 1 – Représentation des nuages de probabilité de présence de l'électron (en haut) et des isosurfaces à 90 % (en bas) pour les orbitales 1s, 2s et 2p. Les couleurs indiquent la phase de la fonction d'onde : positive en rouge, négative en bleu.

2.2 Évolution de la fonction d'onde - Équation de Schrödinger

De même que l'on doit faire appel au principe fondamental de la dynamique pour déterminer l'évolution des vitesses et positions des particules au cours du temps dans un système classique, une description quantique complète nécessite de se donner une équation fondamentale permettant de calculer l'évolution de la fonction d'onde.

Théorème. L'évolution de la fonction d'onde $\Psi(M, t)$ décrivant une particule de masse m évoluant dans un potentiel $V(M)$ obéit à l'équation de **Schrödinger** :

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

où $H(M) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(M)$ est l'opérateur Hamiltonien et Δ l'opérateur Laplacien scalaire.

Remarque : En mécanique quantique, contrairement à d'autres domaines de la physique, la notation mathématique standard complexe est utilisée, soit $i^2 = -1$.

Cette équation d'onde joue pour la fonction d'onde le même rôle pour la fonction d'onde que la deuxième loi de Newton pour la quantité de mouvement. Les techniques pour la résoudre sont très similaires à l'équation de diffusion et à l'équation de d'Alembert.

Dans l'équation de Schrödinger, le premier terme est interprété comme une contribution cinétique, et le deuxième terme provient de l'énergie potentielle de la particule.

2.2.1 Rappel de l'opérateur Laplacien scalaire

Définition. On définit l'opérateur **laplacien scalaire** qui, appliqué à une fonction scalaire, est défini par

$$\Delta f(M) = \operatorname{div}(\overrightarrow{\operatorname{grad}}(f(M))) .$$

En coordonnées cartésiennes, le laplacien s'écrit

$$\Delta f(M) = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(M) + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(M) + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}(M) .$$

En coordonnées cartésiennes, on peut se souvenir que

$$\Delta f = \operatorname{div}(\overrightarrow{\operatorname{grad}} f) = \operatorname{div}\left(\frac{\partial f}{\partial x}\vec{e}_x + \frac{\partial f}{\partial y}\vec{e}_y + \frac{\partial f}{\partial z}\vec{e}_z\right) = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} .$$

2.2.2 Le principe de superposition et ses conséquences

Propriété. L'équation de Schrödinger est **linéaire**. En conséquence, si l'on considère deux solutions Ψ_1 et Ψ_2 de l'équation, alors toute combinaison linéaire $\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2$ de ces solutions sera également solution.

La conséquence du principe de superposition est que l'état d'un système quantique peut être représenté par deux fonctions d'onde en même temps : autrement dit, un système quantique peut se trouver simultanément dans deux états à la fois. D'un point de vue ondulatoire, la superposition de deux états quantiques s'interprète comme une interférence. Soient Ψ_1 et Ψ_2 deux solutions de l'équation de Schrödinger. La densité de probabilité de se trouver dans l'état $\Psi_3 = \lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2$ vaut

$$|\Psi_3(M, t)|^2 = |\lambda_1|^2|\Psi_1|^2(M, t) + |\lambda_2|^2|\Psi_2|^2(M, t) + 2\Re(\lambda_1\lambda_2^*\Psi_1\Psi_2^*)(M, t) ,$$

et a une structure en tout point similaire à celle de la formule de Fresnel des interférences à deux ondes en optique. Le dernier terme joue ici le rôle de terme d'interférences. Ce comportement naturel pour les ondes l'est bien moins si l'on retranscrit cette fonction d'onde comme la description de l'état d'une particule matérielle. Le fait que les particules quantiques puissent se voir attribuer à la fois des propriétés mécaniques (quantité de mouvement, position, masse) et ondulatoires (interférences) est connu sous le nom de **dualité onde-corpuscule**.

Interférences de particules : Par exemple, il est possible de faire interférer des électrons. L'expérience a été réalisée en 1989 par les laboratoires d'Hitachi¹.

Il s'agit d'une expérience de type « fentes d'Young », schématisée figure 2. Des électrons, émis par une source identique à celle d'un microscope électronique, sont accélérés sous une différence de potentiel de 50 kV, puis dirigés vers un ensemble de trois électrodes. Le flux d'électrons émis par la source est contrôlé, de l'ordre de 10^3 électrons par seconde, ce qui correspond à un courant d'intensité 10^{-16} A. Une électrode centrale cylindrique, de diamètre inférieur au micromètre, est portée à un potentiel supérieur de 10 V à celui de deux électrodes planes disposées latéralement. La distance entre les deux électrodes latérales est de 10 mm. La distance entre la source d'électrons et le détecteur est de 1.5 m, les électrons se déplaçant dans le dispositif à environ 10^8 m/s.

1. A. Tonomura et al. « Demonstration of single electron buildup of an interference pattern. » American Journal of Physics, volume 57, février 1989.

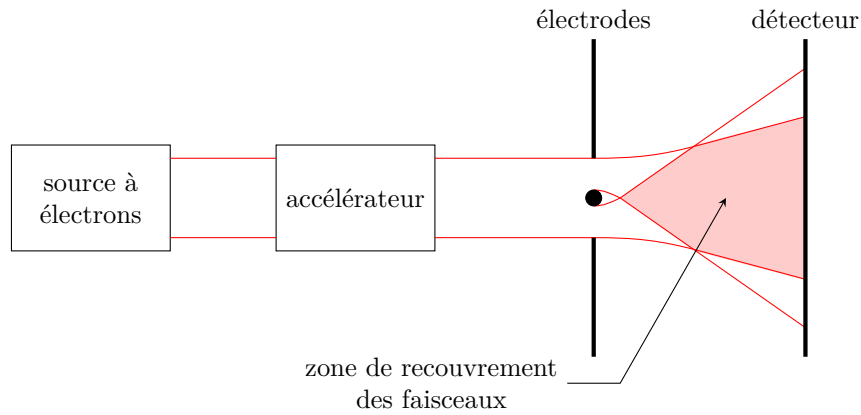


Fig. 2 – Expérience d'interférences d'électrons

Le faisceau électronique est ainsi divisé en deux faisceaux, déviés dans des sens opposés, et se recouvrant dans une zone où un détecteur est placé. En pratique, l'impact d'un électron en un point du détecteur produit de la lumière de fluorescence, qui est ensuite amplifiée et filmée, ce qui permet de repérer l'impact d'un électron sur le détecteur, voir la vidéo et la capture d'écran figure 3. On observe les électrons arriver un par un sur le détecteur. Cependant, lorsqu'un nombre suffisant d'électrons a atteint le détecteur, on constate qu'ils ne sont pas équirépartis. La probabilité qu'un électron arrive en un point du détecteur est donnée par une figure d'interférences.

Des interférences de même type ont été observées avec des objets de plus en plus gros : d'abord des neutrons, puis des atomes de rubidium, et même désormais des molécules comme les fullerènes (C_{60} , masse molaire 720 g/mol) ou depuis 2012 des colorants de la famille des phthalocyanines² (la plus grosse étant de formule $C_{48}H_{26}F_{24}N_8O_8$, masse molaire 1.2×10^3 g/mol).

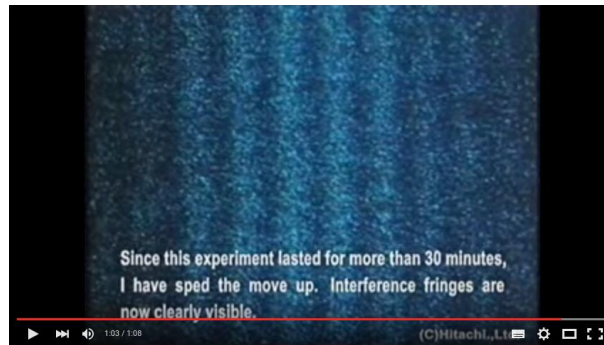


Fig. 3 – Capture d'écran de la vidéo de l'expérience : Vidéo réalisée par A. Tonomura et ses collaborateurs d'Hitachi en 1989 [1].

2.3 Relations de Planck-Einstein et de de Bröglie

Une particule en mécanique classique est décrite en particulier par sa quantité de mouvement $\vec{p} = m\vec{v}$ et par une énergie cinétique. Ces quantités doivent aussi être définies pour un photon, malgré sa masse nulle. De même, il est nécessaire de définir une fréquence ou une longueur d'onde pour un objet matériel, permettant ainsi sa description comme une onde. C'est l'intérêt des relations de Planck-Einstein et de de Bröglie³.

2. Vous trouverez [sur ce lien une vidéo](#) de l'expérience [2].

3. qui se prononce « de Breuille ».

Définition. Les **relations de de Bröglie** indiquent que la quantité de mouvement p d'une particule est donnée par le relation $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ avec $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, $h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ la constante de Planck, et \vec{k} le vecteur d'onde et $k = \|\vec{k}\|$ le nombre d'onde de l'objet.

Pour une particule massive, on a la **longueur d'onde de de Bröglie** $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi}{k}$ avec $p = mv$ la quantité de mouvement de la particule.

De plus, l'énergie d'une particule est donnée par $\mathcal{E} = \hbar\omega$ avec ω la pulsation associée à l'onde de la particule.

2.3.1 Cas du photon

Définition. L'énergie du photon est donnée par les **relations de Planck-Einstein**

$$\mathcal{E}_{\text{photon}} = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$

avec ν leur fréquence (correspondant à l'onde lumineuse) et h la constante de Planck.

De plus, on a $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ avec $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ avec λ la longueur d'onde du photon.

Ces relations sont évidemment équivalentes à celle de de Bröglie pour une particule matérielle, mais elles ont été énoncées avant concernant uniquement le photon, d'où leur dénomination différente.

2.3.2 Comportement quantique ou non ?

Les comportements ondulatoires de la matière correspondent aux phénomènes quantiques. Or il est évident par l'expérience usuelle de chacun que les comportements quantiques de la matière ne sont pas perceptibles à un niveau usuel. Cela a d'ailleurs été confirmé par la technicité nécessaire des expériences mettant en évidence le comportement quantique de la matière.

Propriété. Le caractère ondulatoire des particules devient important lorsque les dimensions caractéristiques du milieu L deviennent de l'ordre de grandeur, ou inférieur, de la longueur d'onde de de Bröglie λ .

Application 1 : Justifier alors que pour une balle de tennis et pour une voiture en déplacement, les aspects quantiques sont négligeables.

Pour retrouver la limite classique, il suffit donc de supposer $\hbar \rightarrow 0$ ce qui implique que toutes les longueurs d'onde de de Bröglie deviennent nulles.

3 Étude d'une particule libre

Les solutions de l'équation de Schrödinger se répartissent en différentes catégories, similaires à celles rencontrées dans l'étude des ondes électromagnétiques.

3.1 Solutions stationnaires

Définition. Une **solution stationnaire** de l'équation de Schrödinger est une fonction d'onde dont les dépendances spatiale et temporelle sont séparées :

$$\Psi(M, t) = \chi(t)\Phi(M).$$

Appliquons cette fonction d'onde à l'équation de Schrödinger, il vient

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(M, t) = H(M)\Psi(M, t) \quad \Rightarrow \quad i\hbar \frac{d\chi}{dt}(t)\Phi(M) = \chi(t)[H(M)\Phi(M)]$$

car l'opérateur Hamiltonien n'a aucun effet sur les variations temporelles. Or, partout où la fonction d'onde n'est pas nulle, on peut écrire

$$i\hbar \frac{d\chi}{dt}(t)\Phi(M) = \chi(t)[H(M)\Phi(M)] \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\chi(t)} i\hbar \frac{d\chi}{dt}(t) = \frac{1}{\Phi(M)} [H(M)\Phi(M)].$$

Par continuité, on pourra étendre cette relation là où la fonction d'onde s'annule.

On constate que le terme de gauche de l'équation ne dépend que du temps alors que celui de droite ne dépend que de la position. Pour que cette relation soit vraie en tout instant et en tout temps, on en déduit que les deux termes de cette équation sont égaux à une même constante.

Définition. On définit les **énergies** \mathcal{E} possibles d'un système comme les **valeurs propres** de l'opérateur Hamiltonien, soit vérifiant l'équation

$$H(M)\Phi(M) = \mathcal{E}\Phi(M).$$

Exemple 1 : Un exemple important dans ce contexte est celui du potentiel coulombien, qui intervient notamment dans la détermination des orbitales électroniques en physique atomique. Pour un noyau de charge Ze , l'équation vérifiée par Ψ s'écrit, si on omet l'interaction entre électrons :

$$\mathcal{E}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\Psi.$$

La solution de cette équation (en coordonnées sphériques) donne notamment les expressions en fonction de r , ϑ et φ des fonctions d'ondes électroniques correspondant aux orbitales s , p , d , f rencontrées en chimie et présentées précédemment.

Il vient donc

$$i\hbar\frac{d\chi}{dt}(t) = \mathcal{E}\chi(t) \quad \Rightarrow \quad i\hbar\frac{d\chi}{dt}(t) - \mathcal{E}\chi(t) = 0.$$

Cette équation différentielle se résout directement en $\chi(t) = \chi_0 \exp\left(\frac{\mathcal{E}}{i\hbar}t\right) = \chi_0 \exp\left(-i\frac{\mathcal{E}}{\hbar}t\right)$.

Propriété. La fonction d'onde stationnaire solution de l'équation de Schrödinger pour un système d'énergie \mathcal{E} fixée s'écrit

$$\Psi(M, t) = \Phi(M) \exp\left(-i\frac{\mathcal{E}t}{\hbar}\right).$$

Rappelle que la relation de de Bröglie indique que \mathcal{E}/\hbar est une pulsation. On interprète donc cette fréquence comme celle contrôlant l'évolution temporelle de la fonction d'onde stationnaire.

3.2 Fonction d'onde d'une particule libre

Définition. Une particule **libre** n'est soumise à aucune interaction. Le potentiel V est nul dans tout l'espace.

L'opérateur Hamiltonien se réduit donc à la partie avec l'opérateur Laplacien, soit $H(M) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$. À une dimension, cette équation devient

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2}(x) + \mathcal{E}\Phi(x) = 0.$$

Les solutions de l'équation précédente se mettent sous la forme

$$\Phi(x) = \alpha e^{ik_x x} + \beta e^{-ik_x x}$$

avec α et β des nombres complexes dépendant des conditions aux limites. Contrairement à d'autres domaines de la physique, on n'utilise pas la notation équivalente avec des fonctions sinusoïdales car la solution recherchée est complexe. Toutefois, l'interprétation de k est la même qu'en physique ondulatoire classique, il s'agit du nombre d'onde.

Propriété. Le **nombre d'onde** $k = \|\vec{k}\| = k_x$ d'une particule libre d'énergie \mathcal{E} est donné par $\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Il s'agit de la **relation de dispersion** d'une particule libre.

À une dimension, on a $k = k_x$.

Cette relation joue le même rôle que celle obtenue dans le cadre des ondes électromagnétiques dans le vide. La différence principale entre ces deux relations est que l'on décrit ici une particule massive, tandis que dans le cas des ondes électromagnétiques les particules décrites sont des photons, qui sont des particules relativistes sans masse, dont l'énergie s'écrit $\mathcal{E} = pc$. La conséquence essentielle de la dépendance en k^2 de l'énergie est que la propagation d'une particule libre est **dispersive**.

Propriété. La solution d'énergie \mathcal{E} de l'équation de Schrödinger pour une particule libre s'écrit sous la forme d'une somme de deux ondes progressives, l'une dans le sens des x croissants et l'autre dans le sens de x décroissants

$$\Psi(x, t) = \alpha \exp[-i(\omega(k_x)t + k_x x)] + \beta \exp[-i(\omega(k_x)t - k_x x)] .$$

avec la pulsation $\omega(k_x) = \frac{\mathcal{E}(k_x)}{\hbar}$.

On retrouve ainsi la relation de de Bröglie entre l'énergie et la pulsation.

La vitesse de propagation de cette onde est la vitesse de phase soit

$$v_\phi = \frac{\omega}{k_x} = \frac{\mathcal{E}(k_x)}{k_x \hbar} = \frac{\hbar k_x}{2m} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}$$

avec v la vitesse de la particule classique selon l'axe x . On constate que ces ondes ne vont pas à la vitesse de la particule classique, elles ne permettent pas de décrire celle-ci. Tout comme en électromagnétisme, il n'y a pas d'interprétation physique de la vitesse de phase.

3.2.1 Interprétation de l'opérateur Hamiltonien

La relation de de Bröglie indique que $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, il vient donc $\mathcal{E} = \frac{p^2}{2m}$. On retrouve l'énergie cinétique classique de la particule.

Lorsque le potentiel est nul, l'opérateur $H(M) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ est égal à l'opérateur \mathcal{E} , qui consiste simplement à multiplier la fonction d'onde par la constante \mathcal{E} . Ainsi, on interprète $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ comme étant associé à l'**énergie cinétique** de la particule.

L'opérateur Hamiltonien est donc la somme de l'énergie cinétique et du potentiel, il s'interprète donc en mécanique classique comme étant l'énergie mécanique totale de la particule.

3.3 Le paquet d'ondes

Les solutions de l'équation de Schrödinger ne sont pas normalisables pour une particule évoluant dans une région de l'espace infiniment étendue. Pour résoudre ce problème, on considère un **paquet d'ondes**, qui s'écrit :

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(k_x) e^{i(k_x x - \mathcal{E}(k_x)t/\hbar)} dk_x ,$$

avec $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(k_x)|^2 dk_x = 1$ pour imposer la normalisation de la fonction d'onde. Une des conséquences de la non-linéarité de la relation de dispersion est le phénomène d'**étalement du paquet d'onde**, rencontré également dans l'étude des ondes électromagnétiques.

Le paquet d'onde se propage à la vitesse de groupe $v_g = \frac{d\omega}{dk_x}$. Or $\omega(k_x) = \frac{\mathcal{E}(k_x)}{\hbar} = \frac{\hbar k_x^2}{2m}$ soit en différenciant $d\omega = \frac{\hbar k_x}{m} dk_x$. Il vient donc

$$v_g = \frac{d\omega}{dk_x} = \frac{\hbar k_x}{m} = v$$

avec v la vitesse de la particule classique selon l'axe x . Cette fois, le paquet d'onde va bien à la vitesse de la particule classique, c'est bien celui-ci qui décrit la particule physique.

Propriété. Une particule libre n'est pas décrite par une onde progressive car celle-ci n'est pas normalisable et ne va pas à la vitesse de la particule classique. La particule libre est décrite par un **paquet d'onde** permettant de gagner ces deux propriétés.

3.3.1 Propriété mathématique de la transformée de Fourier

Considérons le paquet d'onde au temps $t = 0$. Cela ne modifie en rien la généralité du raisonnement quitte à modifier l'origine des temps. On a par définition $\Psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(k_x) e^{ik_x x} dk_x$. Cette grandeur est la transformée de Fourier continue de la fonction ψ . La transformation de Fourier a de très nombreuses propriétés mathématiques ayant des conséquences physiques très nombreuses, mais son étude générale n'est pas au programme. Par exemple, on peut reconnaître *a posteriori* le calcul du brouillage spectral des interférences optiques comme étant la transformée de Fourier du spectre (voir chapitre O2).

La transformée de Fourier généralise la série de Fourier à un signal non périodique car elle décrit la fonction Ψ comme une somme continue de fonctions sinusoïdales. Elle permet ainsi de connaître le spectre, soit les fréquences contenues dans le signal.

Par définition de l'incertitude-type comme un écart-type, on a

$$(\Delta x)^2 = \overline{x^2} - (\bar{x})^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\Psi(x)|^2 dx - \left(\int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x)|^2 dx \right)^2.$$

Propriété. On admet que, si la fonction ψ a une incertitude-type Δk_x , alors sa transformée de Fourier $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(k_x) e^{ik_x x} dk$ a une incertitude-type Δx telle que

$$\Delta x \Delta k_x \geq \frac{1}{2}.$$

Autrement dit, plus une fonction est non nulle sur un petit intervalle, plus il faudra un grand nombre de fréquences élevées pour la décrire cette fonction comme une somme de fonctions sinusoïdales. Cette relation est bien une inégalité. En effet, il est possible d'atteindre la borne inférieure mais cette grandeur peut tout aussi bien être très grande. La démonstration de cette relation est donnée pour la culture au paragraphe 4.

Ainsi, pour localiser précisément une particule libre, soit Δx faible, il faut un spectre, et donc un paquet d'onde, spectralement étendu avec $\Delta k_x \sim 1/(2\Delta x)$.

3.3.2 Inégalité de Heisenberg

En multipliant la relation mathématique précédente par \hbar , il vient $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$, soit la relation d'incertitude d'Heisenberg. Dans une description classique, la position et la quantité de mouvement d'une particule matérielle peuvent être en principe connues avec une précision limitée uniquement celle intrinsèque aux instruments de mesure. En revanche, dans une description quantique, la particule possède également un caractère intrinsèquement ondulatoire. Comme une onde ne peut pas être parfaitement localisée, alors la position et la quantité de mouvement ne sont plus définies avec une précision infinie, et ce indépendamment de toute problématique liée à la mesure.

La visualisation graphique est représenté figure 4. Si on mesure un grand nombre de fois dans des conditions expérimentales identiques la position de la particule, on constate que les mesures sont dispersées. On mesure en réalité expérimentalement la distribution de probabilité $|\Psi(x, 0)|^2$. L'incertitude-type expérimentale mesurée est alors exactement Δx (la notation Δx est historique au lieu de $u(x)$). De même, la distribution de probabilité de p_x étant donné par $|\psi(p_x)|^2$, des mesures répétées de l'impulsion seront dispersées avec une incertitude-type Δp_x .

Propriété. La **relation d'incertitude d'Heisenberg** indique en général $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$ et, en particulier, **si la description de la particule nécessite un traitement quantique**, on a $\Delta x \Delta p_x \sim \hbar/2$ avec Δx l'incertitude-type de la mesure de la position et Δp_x l'incertitude-type de la mesure de l'impulsion. Cette relation indique qu'il est impossible de simultanément localiser avec une précision infinie une particule tout en connaissant avec une précision infinie son impulsion.

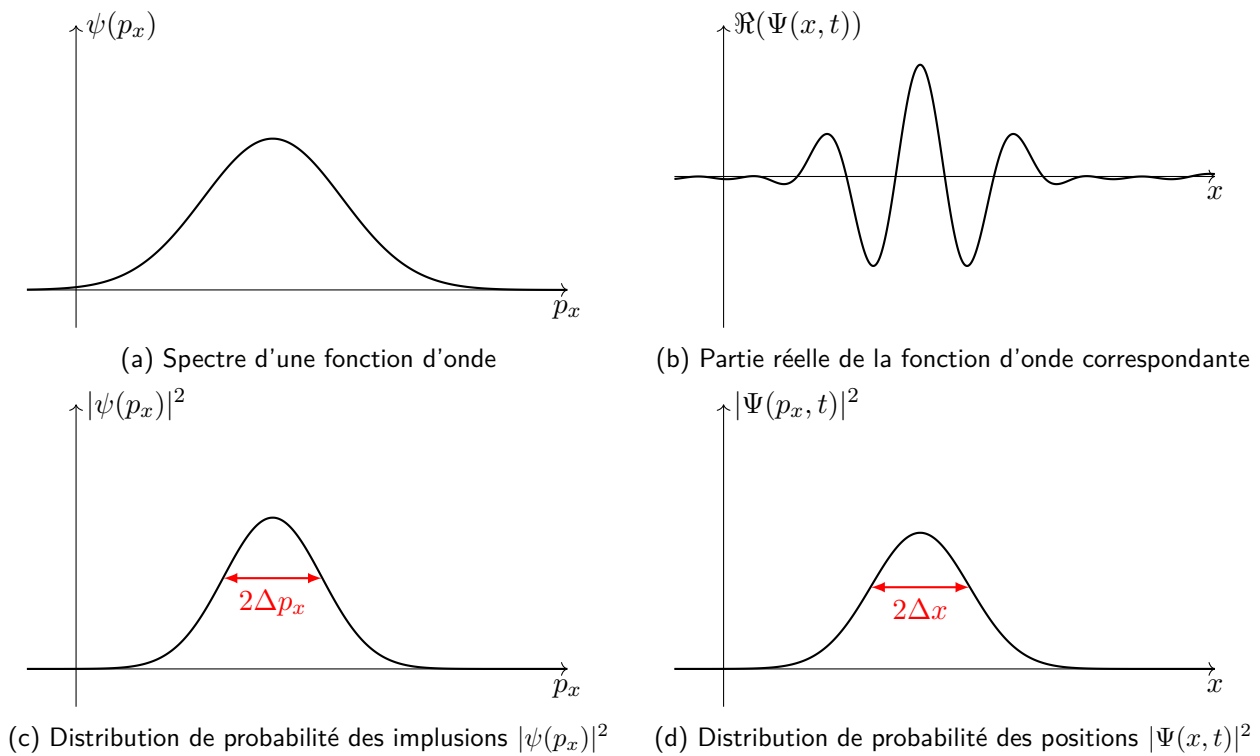


Fig. 4 – Spectre de la fonction d'onde (en impulsion $p_x = \hbar k_x$), fonction d'onde et distributions de probabilités correspondantes (cas gaussien) : visualisation de Δp_x et Δx liés par $\Delta x \Delta p_x \sim \hbar/2$ pour une particule quantique. On constate qu'avec ce paquet d'onde, la position exacte de la particule n'a pas de sens expérimental car la distribution de probabilité de présence de la particule est spatialement étendue. De même, son nombre d'onde exact n'a pas de sens (et donc son impulsion et sa vitesse).

Pour une particule libre, si on sait précisément où elle est mais on ne peut pas mesurer avec précision sa vitesse. Inversement, si on mesure avec précision sa vitesse, on ne peut pas mesurer avec précision sa position, on dit alors qu'elle est « délocalisée », sa probabilité de présence est spatialement très étendue.

Remarque : Cette inégalité peut se réécrire en terme de mesure de temps et de mesure d'énergie. En effet, on a vu que $\Delta \mathcal{E} = p \Delta p / m$. De plus, pour v fixé, on a $\Delta t = \Delta x / v = m \Delta x / p$. En multipliant ces deux relations, on a $\Delta \mathcal{E} \Delta t \geq \hbar/2$.

3.3.3 Le courant de probabilité

Le courant de probabilité est un concept décrivant le flux de densité de probabilité. Tout comme la loi de conservation de la charge en électrodynamique, il existe une loi de conservation de la densité de probabilité en mécanique quantique. Intuitivement, cette dernière indique que lorsque la densité de probabilité dans un volume fixé varie dans le temps, alors il doit exister un flux de densité de probabilité à travers les parois de ce volume. La notion de courant de probabilité permet de décrire ce flux de probabilité.

Définition. On admet que la quantité $\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \overrightarrow{\text{grad}} \Psi^* - \Psi^* \overrightarrow{\text{grad}} \Psi)$ est le **courant de probabilité**, associé à la densité de probabilité $|\Psi|^2$.

La notation z^* fait référence au complexe conjugué de z .

Dans le cas d'une particule libre, pour une fonction d'onde s'écrivant $\Psi_0 e^{-i(\omega(k)t - kx)}$, on a $\overrightarrow{\text{grad}} \Psi = ik \Psi \vec{e}_x$ et on trouve

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} (-ik \Psi \Psi^* - ik \Psi^* \Psi) = |\Psi_0|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m} \vec{e}_x = |\Psi_0|^2 \vec{v}_g,$$

soit la norme de la densité de probabilité multipliée par la vitesse de groupe, soit la vitesse de la particule. Le courant de probabilité se déplace logiquement avec la particule.

4 Complément : démonstration de l'inégalité $\Delta x \Delta k_x \geq 1/2$

Cette démonstration est hors programme. Elle est donnée pour la culture.

Pour simplifier le problème, nous allons étudier une fonction d'onde Ψ de moyenne nulle et décrite par un spectre ψ de moyenne nulle. On admet que cette simplification calculatoire ne diminue en rien la généralité de la démonstration.

Commençons par définir les incertitudes. Les définitions qui suivent sont données celles des incertitudes-type expérimentales, il s'agit d'un écart-type des observables x et k_x pondérées par leurs distributions de probabilités (supposées ici de moyennes nulles), soit

$$(\Delta x)^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\Psi(x)|^2 dx \quad \text{et} \quad (\Delta k_x)^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} k_x^2 |\psi(k_x)|^2 dk_x .$$

Par ailleurs, on sait que, par définition, on a

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(k_x) e^{ik_x x} dk_x .$$

En admettant que toutes les hypothèses de dérivation sous le signe somme sont vérifiées, car elles le sont, on a

$$\frac{d\Psi}{dx}(x) = i \int_{-\infty}^{+\infty} k_x \psi(k_x) e^{ik_x x} dk_x .$$

On applique ensuite le théorème de Parseval, admis, qui indique que la norme d'une fonction est égale à la norme de sa transformée de Fourier, soit

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{d\Psi}{dx}(x) \right|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |k_x \psi(k_x)|^2 dk_x = (\Delta k_x)^2 .$$

Ce théorème s'interprète en indiquant que l'énergie totale du signal est égale à la somme des énergies présente dans chaque harmonique.

Remarque : Ce résultat est en réalité fondamental en mécanique quantique. En effet, l'observable impulsion p_x est égale à l'opérateur $i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$.

Ceci étant montré, on utilise l'inégalité de Cauchy-Schwarz sur le produit scalaire défini par l'intégrale $\int f^* g$ où la notation z^* fait référence au complexe conjugué, soit

$$\left| \int_{-\infty}^{+\infty} (x\Psi(x))^* \frac{d\Psi}{dx}(x) dx \right|^2 \leq \left(\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\Psi(x)|^2 dx \right) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{d\Psi}{dx}(x) \right|^2 dx \right) = (\Delta x)^2 (\Delta k_x)^2 .$$

Or, on peut intégrer par partie

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (x\Psi(x))^* \frac{d\Psi}{dx}(x) dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx - \int_{-\infty}^{+\infty} x\Psi(x) \left(\frac{d\Psi}{dx}(x) \right)^* dx$$

où les termes de bord s'annulent car les fonctions sont de carré sommable.

D'où

$$\begin{aligned} 2\Re \left(\int_{-\infty}^{+\infty} (x\Psi(x))^* \frac{d\Psi}{dx}(x) dx \right) &= \int_{-\infty}^{+\infty} (x\Psi(x))^* \frac{d\Psi}{dx}(x) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} x\Psi(x) \left(\frac{d\Psi}{dx}(x) \right)^* dx \\ &= - \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = -1 . \end{aligned}$$

Or, par définition, le module de tout nombre complexe est plus grand que sa partie réelle, il vient donc

$$\left| \int_{-\infty}^{+\infty} (x\Psi(x))^* \frac{d\Psi}{dx}(x) dx \right|^2 \geq \left(\Re \left(\int_{-\infty}^{+\infty} (x\Psi(x))^* \frac{d\Psi}{dx}(x) dx \right) \right)^2 = \frac{1}{4} \quad \text{d'où} \quad \Delta x \Delta k_x \geq \frac{1}{2} .$$

Références

- [1] <https://www.youtube.com/watch?v=ZJ-0PBRuthc>
- [2] https://www.youtube.com/watch?v=NUS6_S1KzC8