# Rappel

**Les notions d’onde et de particules sont incomplètes**. Elles ne sont que des descriptions partielles du comportement de matière et lumière. Les objets régis par les lois de la Physique Quantique peuvent avoir un comportement plus complexe.

L’expérience de Young à deux fentes, menée avec des particules uniques, montre comment une particule peut manifester un comportement ondulatoire et produire de l’interférence.

**Si par contre on essaie d’acquérir de l’information sur sa nature de particule** – notamment sa trajectoire, qu’on appelle «which-path information» - **le comportement ondulatoire disparaît** et on ne voit plus les franges d’interférence.

Cette exclusion mutuelle entre comportement ondulatoire et corpusculaire est incontournable. Si on essaie d’acquérir une «which-path information» partielle, la figure d’interférence disparaît partiellement.

Cette expérience de pensée est une illustration très puissante du **principe de complémentarité**, énoncé par Niels Bohr en 1928. **Chaque objet quantique peut manifester un comportement ondulatoire ou corpusculaire, mais les deux ne peuvent jamais être manifestés simultanément.**

Il nous reste à comprendre la nature et la signification de l’onde associée à la matière.

# Cours 05

Le principe d’incertitude de Heisenberg

Interprétation de la Physique Quantique

La fonction d’onde et la densité de probabilité

La particule dans un puits avec barrières impénétrables

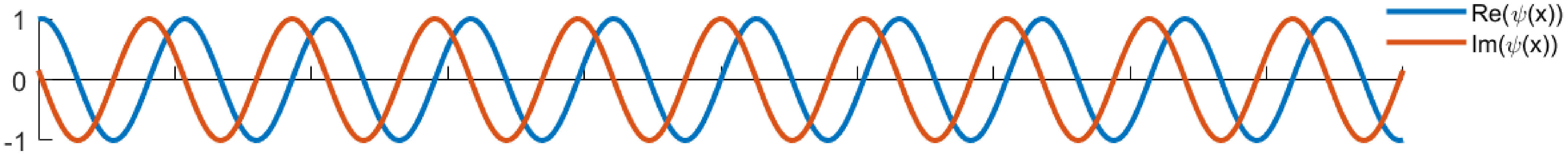
# Le principe d'incertitude de Heisenberg

**Le principe d'incertitude de Heisenberg est un cas spécial du principe de complémentarité.**

L'analogie entre l'onde de de Broglie et l'onde électromagnétique nous indique que la forme d'une onde de de Broglie avec une longueur d'onde $\lambda$ fixée, est une onde plaine:

$$\psi(x) \propto e^{\frac{2\pi i}{\lambda} x}$$

On remarque que cette onde existe dans tout l'espace! Elle est infiniment étendue!




On verra plus tard que, **selon l'interprétation orthodoxe de la physique quantique, le module carré de cette onde exprime la (densité de) probabilité de trouver la particule à l'endroit *x*.**

Une onde de de Broglie donc a une impulsion bien définie, $p=h/\lambda$, mais la position est totalement indéterminée, car la probabilité est uniforme dans tout l'espace.

# Le principe d'incertitude de Heisenberg

Nous pouvons aussi considérer le cas limite opposé, c.-à-d. **une onde qui est infiniment localisée à un endroit de l'espace**. Le seul instrument mathématique possible pour exprimer une telle onde est la fonction delta de Dirac:

$$\psi(x) \propto \delta(x - x_0)$$

La transformée de Fourier de cette fonction généralisée nous dit qu'elle est faite **d'une superposition d'ondes de de Broglie avec toutes les possibles valeurs de la longueur d'onde, et donc de l'impulsion**.

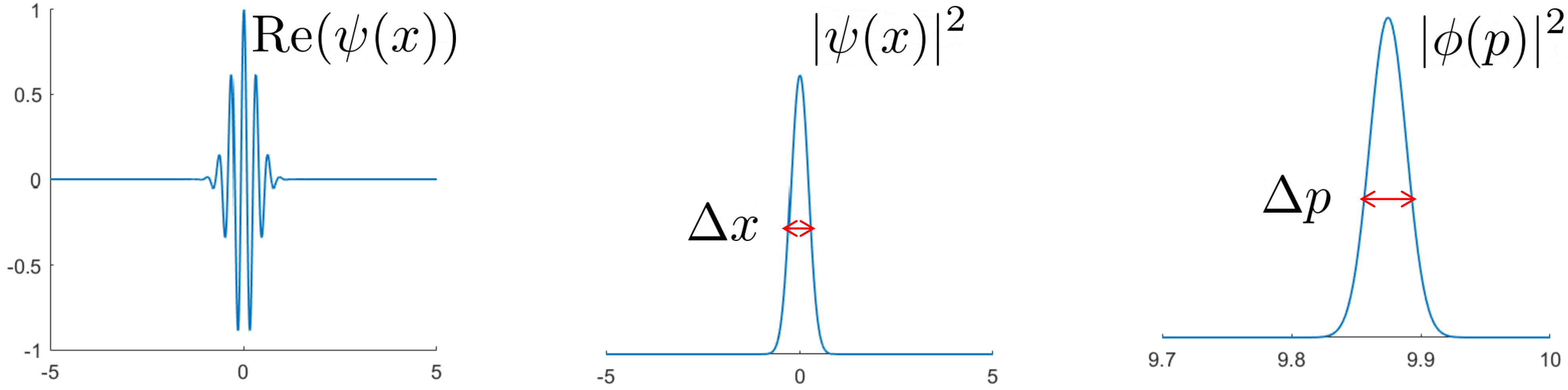
$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ip(x-x_0)/\hbar} dp \qquad p = \frac{h}{\lambda} \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Cet autre cas limite correspond à une position infiniment déterminée et une impulsion totalement indéterminée.

# Le principe d’incertitude de Heisenberg

Les cas intermédiaires entre ces deux cas limites sont de loin les plus communs dans la réalité qui nous entoure.

La «fonction d’onde» d’une particule a la plupart des fois la forme d’un **paquet d’onde**.




$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx$$

# Le principe d’incertitude de Heisenberg

**Le principe d’incertitude de Heisenberg** affirme que les étendus des paquets d’onde en x et en p sont liés par:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

On comprend ce principe de la façon suivante: **Il est impossible de connaître simultanément la position exacte et la quantité de mouvement exacte d’un objet quantique**.

Plus on cherche à connaître la position avec précision, plus on doit renoncer à l’information sur la quantité de mouvement, et vice-versa.

Le lien avec le principe de complémentarité vient du fait que la connaissance de la position est une caractéristique du comportement corpusculaire, alors que la connaissance de l’impulsion (et donc de la longueur d’onde) est une caractéristique du comportement ondulatoire.

Le principe d’incertitude n’est pas une simple conséquence des limites techniques des instruments de mesure. **Il est plutôt une propriété fondamentale des lois de la nature**.

# Interprétation orthodoxe de la Physique Quantique

L'interprétation orthodoxe de la physique quantique, connue aussi comme **interprétation de Copenhague**, a été introduite pour la première fois par Max Born en 1928.

Selon cette interprétation, **l'onde associée à une particule est une expression de l'amplitude de probabilité de trouver la particule à un certain endroit de l'espace**. Essayons de comprendre avec une analogie:

Pour le rayonnement électromagnétique classique, la probabilité par unité de volume de trouver un photon à un endroit de l'espace est proportionnelle au nombre de photons par unité de volume, qui à son tour est proportionnel à l'intensité du rayonnement, soit au carré du champ

$$\frac{\mathrm{Prob}}{V} \propto \frac{N}{V} \qquad \frac{N}{V} \propto I \qquad I \propto E^2$$

On conclut que, pour le champ électromagnétique, la **densité de probabilité de mesurer un photon à un endroit de l'espace** est proportionnelle au carré du champ qui existe è cet endroit.

$$\frac{\mathrm{Prob}}{V} \propto E^2$$

# Interprétation orthodoxe de la Physique Quantique

Par analogie, en suivant l'idée qu'à une particule est associée une onde selon la dualité onde-particule vue auparavant, on peut poser que **la densité de probabilité par unité de volume de trouver une particule à un endroit de l'espace est proportionnelle au carré de l'amplitude de l'onde associée à la particule**.

Il ne faut pas cependant pousser cette analogie trop loin. Il n'existe aucun moyen formel de «démontrer» ce fait à partir de principes premiers, et on doit l'accepter comme un **postulat de la théorie**. En particulier:

**L'onde associée à une particule ne correspond à aucune quantité physique mesurable**. Au contraire, le champ électrique est une quantité physique parfaitement mesurable.

**L'onde associée à une particule prend des valeurs complexes**. On verra par la suite que ce fait est requis par la théorie. Au contraire, le champ électrique est une quantité réelle (car mesurable).

On appelle l'onde qui décrit l'état d'une particule à un instant donné, **la «fonction d'onde».** Typiquement elle est indiquée par $\psi(\mathbf{r})$ et prend des valeurs complexes. On l'appelle parfois **«amplitude de probabilité».**

La probabilité de trouver la particule dans un volume infinitésimal dV autour de la position r à un instant donné, est donc

$$dP(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2 dV$$

Où $|\psi|^2 = \psi^* \psi$ es le module carré de la valeur complexe de la fonction d'onde. C'est **la règle de Born.**

# Interprétation orthodoxe de la Physique Quantique

**La fonction d’onde contient le maximum d’information physique sur la particule**. La **règle de Born** nous dit **qu’en Physique Quantique la position des particules n’est pas complètement déterminée**, contrairement à la physique classique où on décrit la trajectoire d’un point matériel. Cette idée est bien entendu liée au principe d’incertitude de Heisenberg.

Plusieurs questions fondamentales restent ouvertes.

Quelle est la loi qui détermine la forme de la fonction d’onde pour un système donné?

Puisque en nature les objets bougent avec le temps, comment le temps entre-t-il dans la théorie de la Physique Quantique?

Si la position n’est pas déterminée, que se passe-t-il lorsqu’on mesure la position d’une particule?

Comment on introduit les autres quantités physiques dans cette description? Par exemple l’impulsion, le moment cinétique, etc?

Comment décrit-on un système formé de plusieurs particules? Quelle sera l’amplitude de probabilité pour chaque particule?

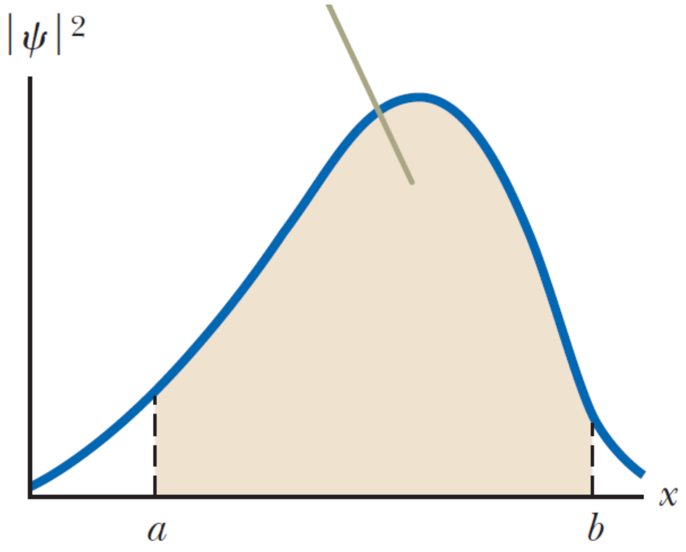
# La particule libre en une dimension

Si on se restreint à une dimension x, la fonction d'onde est liée à la probabilité de mesurer la particule dans une intervalle infinitésimale dx selon

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

La probabilité de trouver la particule dans une intervalle entre x=a et x=b est donc

$$P_{ab} = \int_a^b |\psi(x)|^2 dx$$




La probabilité de trouver la particule tout court, doit être 1. Donc:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

La fonction d'onde doit obéir à cette condition. On dit qu'elle est **normée**.

# La valeur moyenne d'une mesure

Les lois élémentaires de la probabilité posent que la valeur moyenne d'une quantité x, caractérisée par une certaine distribution de probabilité p(x), se calcule en faisant la somme des valeurs possibles multipliées par les probabilités respectives. Pour la position x de la particule nous pouvons donc écrire

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x|\psi(x)|^2 dx$$

On appelle cette quantité **«valeur moyenne» ou «espérance» de x** (en anglais c'est **«expectation value»**)

Si on a une quantité physique *f(x)* qui dépend de la position de la particule, on calcule sa moyenne comme

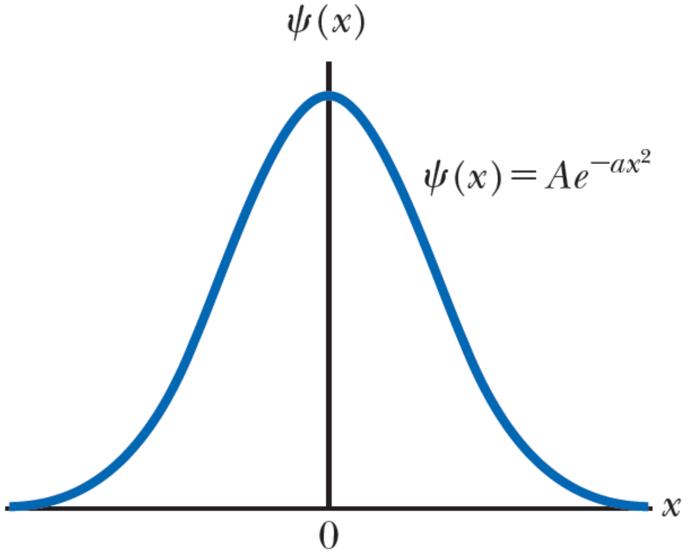
$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)|\psi(x)|^2 dx$$

Mais comment doit-on interpréter cette valeur moyenne? L'interprétation correcte est la suivante. Si on considère **beaucoup de particules** (indépendantes l'une de l'autre), **chacune décrite par la même fonction d'onde** $\psi(x)$, et on mesure la position de chaque particule, on obtiendra un ensemble de valeurs dont la valeur moyenne sera donnée par $\langle x \rangle$

# Exemple: le paquet d'onde Gaussien

Un état très commun pour une particule est le paquet d'onde Gaussien

$$\psi(x) = Ae^{-ax^2}$$




Pour calculer le facteur A, on impose la norme de la fonction d'onde

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

En calculant l'intégrale Gaussienne, on a finalement

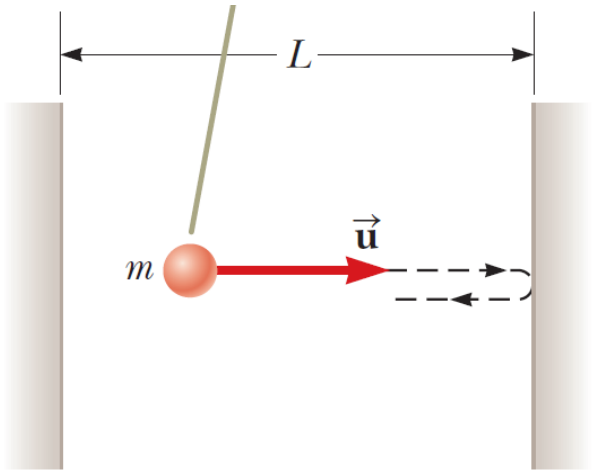
$$\int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-2ax^2} = A^2 \sqrt{\frac{\pi}{2a}} \quad \rightarrow A = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4}$$

On peut calculer aussi la moyenne de x, qui vaut zéro car on intègre une fonction impaire, et la variance qui vaut

$$\Delta x = \left(\int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle x \rangle)^2 |\psi(x)|^2 dx\right)^{1/2} = \frac{1}{2\sqrt{a}}$$

# La particule dans un puits de potentiel infini

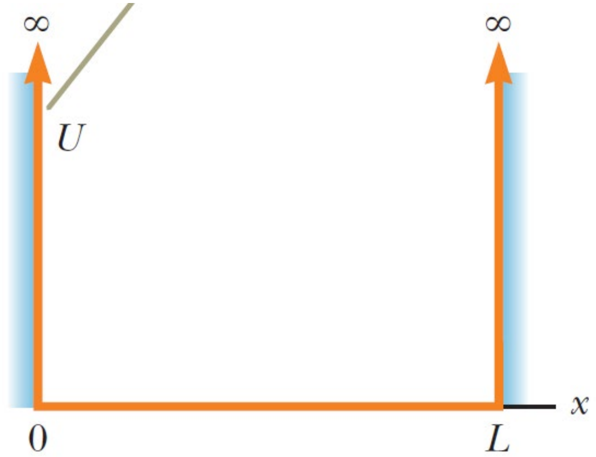
On considère une particule confinée dans une région de l'espace qui va de x=0 à x=L. On peut s'imaginer que ce confinement est produit par **deux barrières impénétrables**. Ces barrières sont décrites mathématiquement par un puits de potentiel avec barrières de hauteur infinie.




Dans la région du puits la particule se comporte comme une particule libre. Si c'était une particule classique, elle pourrait avoir une vitesse arbitraire.

En physique quantique, le mouvement à l'intérieur du puits serait donc décrit par l'onde de de Broglie

$$\psi(x) = e^{i(kx+\phi)} \qquad k = p/\hbar$$




La phase $\phi$ arbitraire permet d'exprimer la fct d'onde comme

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$$

On trouvera ce résultat par la suite en résolvant l'équation de Schrödinger.

# La particule dans un puits de potentiel infini

Comment choisi-t-on A et B? Si les barrières sont impénétrables, il faut que la probabilité de trouver la particule à l'extérieur du puits soit zéro. **La fonction d'onde doit donc être zéro pour x<0 et x>L**.

**La fonction d'onde en Physique Quantique doit être continue**. C'est une propriété qui découle de l'équation de Schrödinger qu'on verra par la suite. Il faut donc que la fonction d'onde s'annule aussi en x=0 et x=L. On en déduit qu'il faut poser B=0. On a donc

$$\psi(x) = A\sin(kx) \qquad\qquad k = p/\hbar = 2\pi/\lambda$$

Pour la même raison, la fonction d'onde doit s'annuler aussi en x=L. Ceci n'est possible que pour des valeurs discrètes de la longueur d'onde de de Broglie $\lambda$. La condition sur la longueur d'onde est

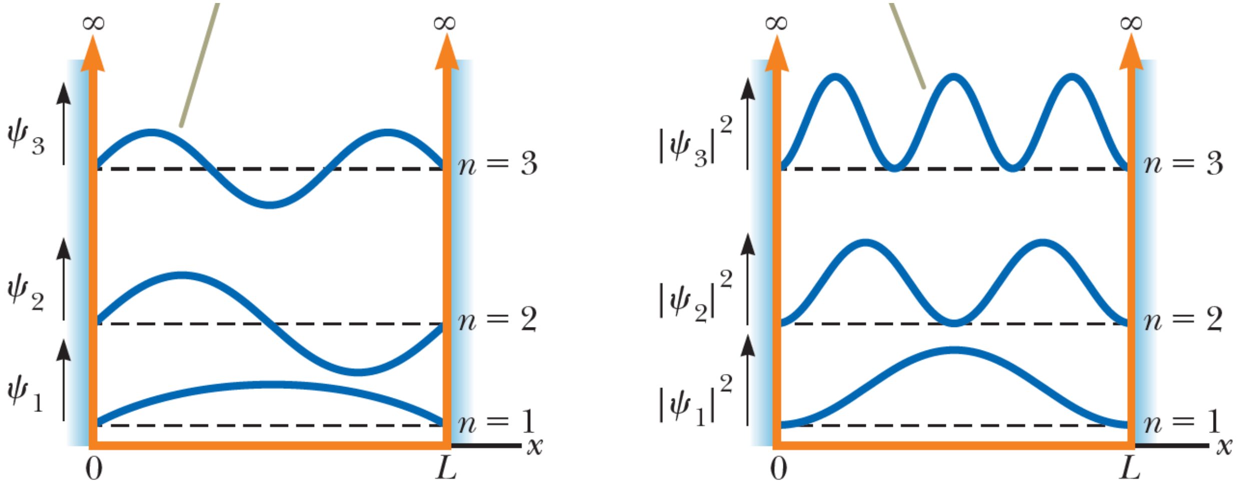
$$\frac{2\pi L}{\lambda} = n\pi \qquad n = 1,\, 2,\, 3, \ldots$$

Les fonctions d'onde des différents états possibles sont donc (après avoir calculé la norme)

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

# La particule dans un puits de potentiel infini

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$




Dans la figure, pour chaque valeur de n la fonction est dessinée déplacée vers le haut, pour pouvoir les distinguer. A droite on a la densité de probabilité correspondante.

On remarque que pour n=1 la probabilité de trouver la particule n'est zéro qu'aux bords du puits.

Pour n>1, on a aussi des points à l'intérieur du puits où la particule ne peut pas se trouver! Un tel comportement est typique du comportement ondulatoire et n'a pas d'analogue en physique classique.

**On appelle n le «nombre quantique»**. Il caractérise les différents états possibles de la particule.

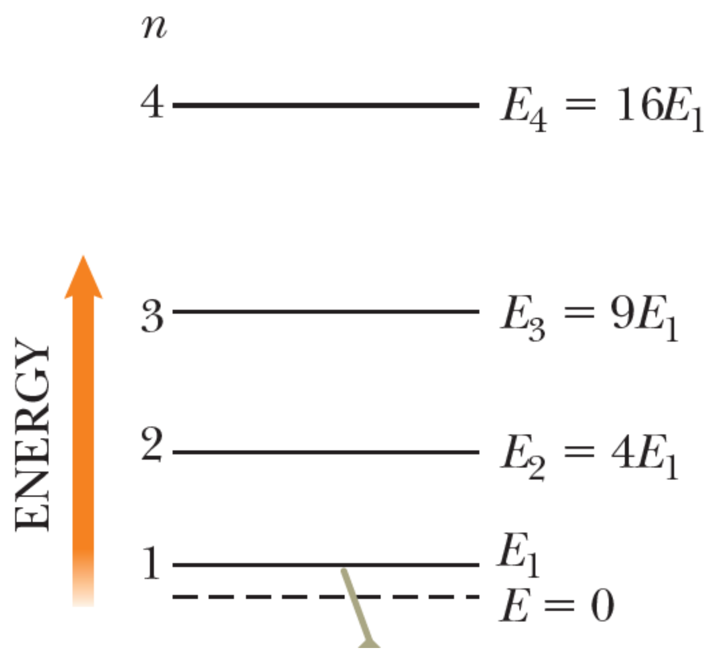
# La particule dans un puits de potentiel infini

A partir de la condition sur la longueur d'onde, on peut déduire une condition sur **l'impulsion, qui est aussi quantifiée**

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2L/n} = \frac{nh}{2L}$$

De la quantification de l'impulsion on peut déduire celle de l'énergie

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{h^2 n^2}{8mL^2} \qquad n = 1,\ 2,\ 3, \ldots$$




**L'énergie d'une particule confinée dans l'espace est donc quantifiée!**

L'état de plus basse énergie, avec n=1, s'appelle en Physique Quantique **«état fondamental»** (**«ground state»** en anglais). Pour une particule confinée, son énergie est $E_1>0$. **En Physique Quantique, contrairement à la physique classique, une particule confinée n'est jamais au repos!**

On a maintenant une base pour expliquer la quantification de l'énergie. Remarquez que **les valeurs discrètes n'ont pas toutes le même espacement**. C'est le cas en général. Le seul système avec énergies également espacées est l'oscillateur harmonique comme on le verra plus loin.

# Questions ouvertes

Quelle est la loi qui régit le comportement de la fonction d’onde? Et quelle est la loi qui régit l’évolution dans le temps de la fonction d’onde?

Comment interpréter la règle de Born? Que se passe-t-il si je fais deux fois de suite la mesure de la position sur la même particule? La fonction d’onde change-t-elle comme conséquence d’une mesure? Si oui, que devient-elle?

Comment on décrit les autres quantités physiques, telles que impulsion, moment cinétique, etc.? Et comment la théorie décrit-elle le processus de mesure de ces quantités?

Comment on généralise la théorie au cas avec plusieurs particules en interaction?