Rappèl

L'interprétation orthodoxe de la Physique Quantique implique que le carré de la fonction d'onde exprime la **densité de probabilité par unité de volume**, de trouver la particule à chaque endroit de l'espace.

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

Une mesure de la position de la particule sera donc caractérisée en général par une **incertitude**.

L'interprétation correcte de l'incertitude est la suivante: un système est préparé dans un état $\psi(x)$donné. On mesure la position de la particule et on obtient une certaine valeur x_1. On prépare un autre système dans le même état $\psi(x)$. Une nouvelle mesure de la position donnera en une valeur x_2 qui est en général différente de x_1.

Cette incertitude n'est pas due au manque de précision de l'expérimentateur ou de l'instrument de mesure. **Elle est une caractéristique intrinsèque de l'état du système selon les lois de la Physique Quantique**.

Chaque état est caractérisé par sa propre distribution de probabilité $|\psi(x)|^2$et donc par sa propre incertitude.

En particulier, l'onde plaine de de Broglie et la fonction d'onde de type «delta» de Dirac, sont les deux cas limite. Ils ont respectivement incertitude infinie et zéro.

Rappèl

La mesure de toute quantité physique, et pas seulement celle de la position, est caractérisée par une incertitude.

En particulier, la mesure de l'impulsion (ou quantité de mouvement) est caractérisée par une incertitude Δp

Le principe d'incertitude de Heisenberg affirme que, quoiqu'elle soit la fonction d'onde $\psi(x)$ qui décrit l'état de la particule, les deux incertitudes sur la position et sur l'impulsion doivent satisfaire l'inégalité

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

Quoiqu'il soit l'état de la particule, il est donc impossible de connaître sa position et son impulsion simultanément avec précision arbitraire.

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

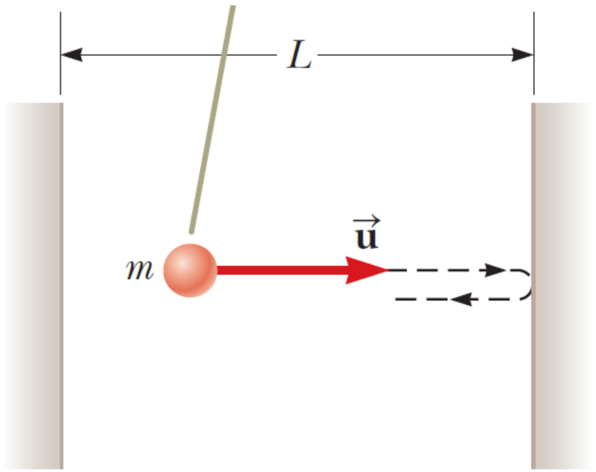
Cours 06

La particule dans un puits avec barrières impénétrables

L’équation de Schrödinger

La particule dans un puits de potentiel infini

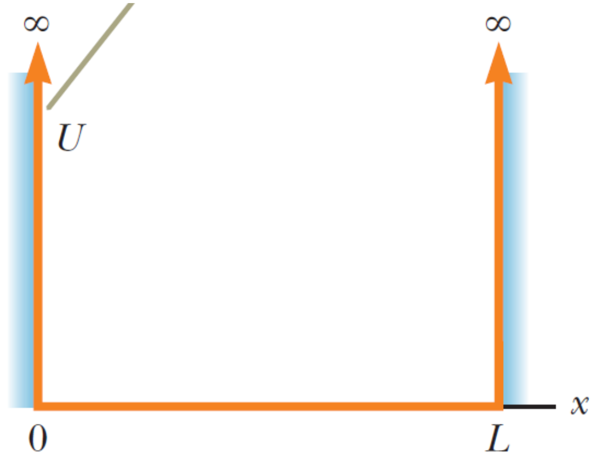
On considère une particule confinée dans une région de l'espace qui va de x=0 à x=L. On peut s'imaginer que ce confinement est produit par **deux barrières impénétrables**. Ces barrières sont décrites mathématiquement par un puits de potentiel avec barrières de hauteur infinie.



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 ϕ 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

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

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 λ. La condition sur la longueur d'onde est

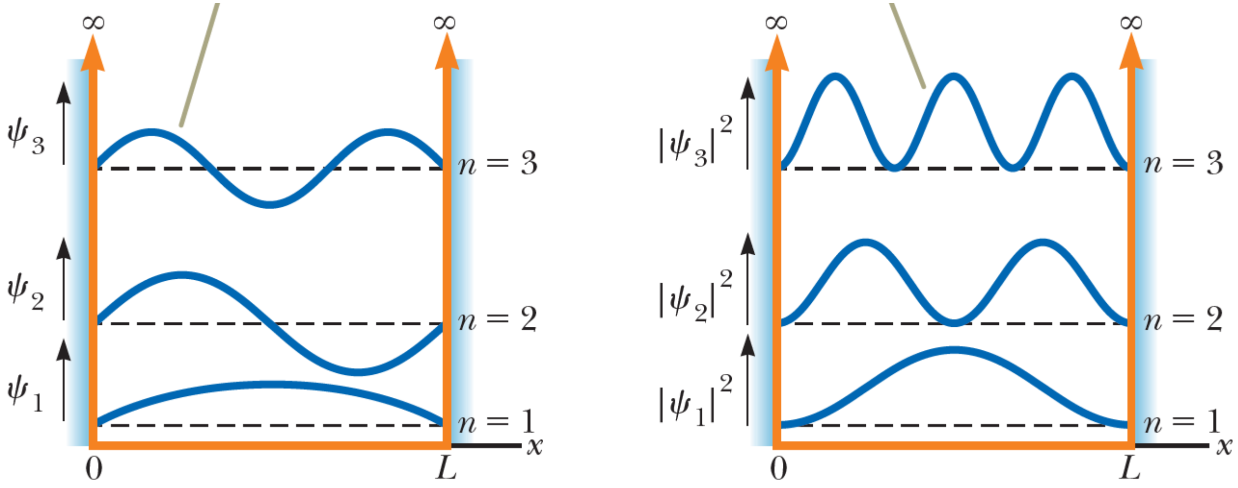
$$\frac{2\pi L}{\lambda} = n\pi \qquad n = 1,\, 2,\, 3, \ldots$$

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.

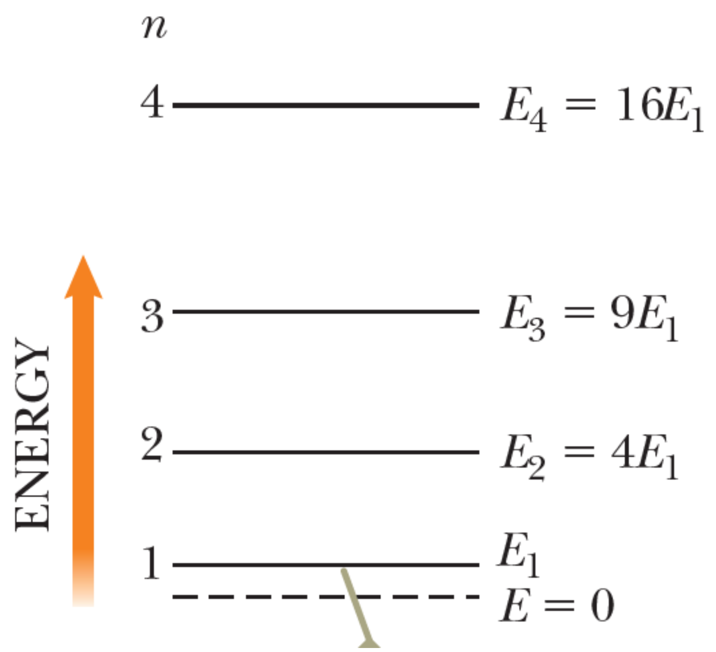
La particule dans un puits de potentiel infini

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.

L’équation de Schrödinger

L’équation de Schrödinger est la loi physique qui décrit la fonction d’onde $\psi(x)$. Elle a été développée par Erwin Schrödinger en 1926.

L’équation de Schrödinger est un postulat de la théorie. Cela veut dire qu’elle ne peut pas être déduite de principes plus fondamentaux.

Pour une particule de masse *m* soumise à un potentiel externe $U(x)$, l’équation de Schrödinger est

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Où *E* est l’énergie totale de la particule (cinétique plus potentielle), et $\hbar = h/2\pi$.

Pour bien comprendre la signification de cette équation, il faut se poser plusieurs questions.

L'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Que décrit-elle exactement l'équation de Schrödinger?

L'équation de Schrödinger ci-dessus est dite **équation de Schrödinger indépendante du temps**. Elle décrit les **états stationnaires** possibles du système.

Les états stationnaires sont les états du système avec **une valeur bien déterminée de l'énergie**.

Pour ces états, **la forme de la fonction d'onde reste la même dans le temps**, d'où leur nom.

Pour comprendre, on peut faire l'analogie avec les modes résonnants d'un système harmonique, qui ont une valeur bien déterminée de la fréquence.

L’équation de Schrödinger

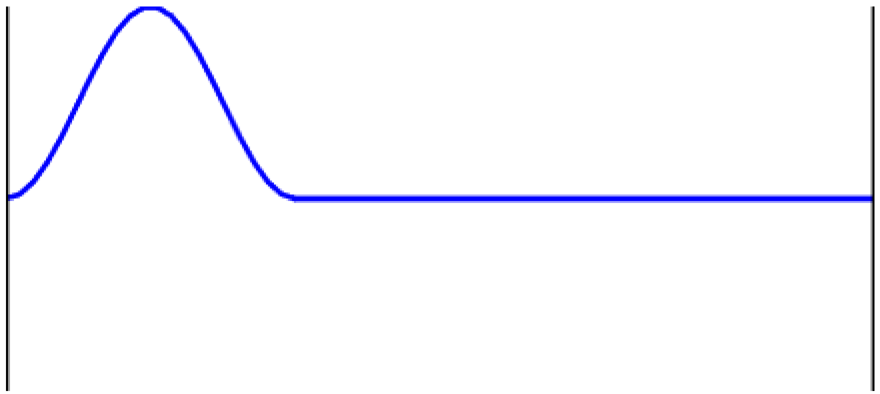
Un système peut se trouver dans un **état non stationnaire**.

Un état non stationnaire est caractérisé par **une incertitude dans la valeur de l’énergie totale**.

La forme de l’état non stationnaire change dans le temps.

Ce changement n’est pas directement décrit par l’équation de Schrödinger indépendante du temps, vue avant. Il est décrit par **l’équation de Schrödinger dépendante du temps**, qu’on énoncera prochainement.

Pour notre analogie avec un système harmonique, il faut penser par exemple à une corde sollicitée par une déformation locale, qui va se propager comme un paquet d’onde.



L’équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

Dans l’équation de Schrödinger, l’énergie E est un paramètre à déterminer. Les plusieurs solutions possibles de l’équation auront en général des différentes valeurs de E (mais il est possible que plusieurs solutions aient la même valeur de E).

Une solution $\psi(x)$ avec une valeur de l’énergie E, est dite «état propre». La valeur de E est dite «valeur propre» de l’énergie.

L’équation de Schrödinger: la particule libre

Etudions un cas simple: **la particule libre**. Dans ce cas on n’a pas de forces externes et *U(x)=0*.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$$

C’est une équation différentielle de deuxième ordre à coefficients constants. Sa solution est

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

C’est bien l’onde plaine que nous savons décrire la particule libre de la théorie de de Broglie. En particulier, la théorie de de Broglie nous dit que

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}$$

Si on remplace dans la condition pour *k* obtenue de l’équation, on obtient

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

qui est bien l’expression pour l’énergie cinétique de la particule libre.

On voit que **dans le cas de la particule libre toutes les valeurs possibles de *E* correspondent à un état possible du système.**

L’équation de Schrödinger: Conditions au bord

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

Plus **en général**, en présence d’un potentiel U(x) externe, **pas toutes les valeurs de E correspondent à des états possibles pour le système**.

L’équation, ensemble avec le fait que la fonction d’onde doit être normée, impose des **conditions au bord**.

En particulier, on demande que **la fonction d’onde soit continue** partout dans l’espace.

Pour le voir, on remarque que l’équation établit une relation de proportionnalité entre la fonction d’onde et sa deuxième dérivée. Or, si la fonction est discontinue, sa deuxième dérivée le sera aussi. Mais une fonction dont la deuxième dérivée est discontinue, ne peut pas en général remplir le critère de norme finie. Il faut donc nécessairement que la fonction d’onde soit continue.

Un argument similaire nous permet de conclure que **la première dérivée de la fonction d’onde doit aussi être continue**.

Dans un grand nombre de systèmes physiques, ces deux conditions ne peuvent être remplies que par des solutions avec **des valeurs discrète de l’énergie propre *E***.

L'équation de Schrödinger: Puits infini

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Revenons au système d'un puits de potentiel avec barrières impénétrables

$$U(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ +\infty & x < 0 \text{ ou } x > L \end{cases}$$

Partout où le potentiel est infini, il faut que la fonction d'onde soit zéro, autrement la deuxième dérivée va être infinie. Donc il faut

$$\psi(x) = 0 \qquad\qquad x < 0 \text{ et } x > L$$

L’équation de Schrödinger: Puits infini

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

La continuité de la fonction d’onde impose que $\psi(x)=0$ aussi pour *x=0* et *x=L*. Ceci impose deux conditions sur les quantités A, B, et k, qui caractérisent la solution générale de l’équation différentielle.

$$\psi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$$

On aura *B=-A* et

$$kL=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}L=n\pi \quad n=1,\,2,\,3,\ldots$$

Ceci n’est possible que pour des valeurs discrètes de l’énergie. On obtient donc les valeurs propres et les états propres suivants

$$E_n=\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\right)n^2 \qquad \psi_n(x)=A\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Ce sont les états vus avant, mais nous les avons déduits directement de l’équation de Schrödinger.

L’équation de Schrödinger: L’impulsion

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

On voit apparaître dans l’équation de Schrödinger l’énergie totale E et l’énergie potentielle U. On sait que la relation *E=K+U* doit valoir, où *K* est l’énergie cinétique.

On peut écrire l’équation comme $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$ où $\hat{H}$ est un «opérateur» qui agit sur la fonction d’onde.

Cette opérateur est dit «Hamiltonien» et il est exprimé comme $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)$

Intuitivement on pourrait s’attendre *H=E*. Pour cela il faut que la partie avec la dérivée soit égale à l’énergie cinétique *K*:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} = K = \frac{p^2}{2m}$$

Ceci est possible si on pose $p = -i\hbar\frac{d}{dx}$

En Physique Quantique, **les quantités physiques sont décrites par des opérateurs** agissant sur la fonction d’onde

Questions ouvertes

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

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?