

# MECANIQUE QUANTIQUE

Historique , principes généraux.

« La question est évidemment : allez-vous comprendre ce que je vais vous dire ? Croyez-vous vraiment que je puisse vous expliquer tout cela de manière que vous le compreniez ? Non , ce n'est pas sérieux : vous n'allez certainement pas comprendre. Pourquoi ? Tout simplement parce que je n'y comprends rien moi-même ... Personne d'ailleurs n'y comprend rien !

*La théorie de l'électrodynamique quantique nous fournit une description de la Nature qui est absurde du point de vue du sens commun. Mais elle est en accord parfait avec l'expérience. J'espère donc que vous accepterez la Nature telle qu'elle l'est : absurde! »*

*Feynman*

# Sommaire

---

1. *Introduction*
2. *Le corps noir*
3. *Le photon*
4. *Chaleur spécifique des solides*
5. *Le spectre des atomes*
6. *Premiers principes de la mécanique quantique*
7. *Équation de Schrödinger*
8. *L'oscillateur harmonique*
9. *Quelques exemples et conclusion*

# Introduction

La physique à la fin du 19<sup>e</sup> est dominée par 3 grandes théories :

- ✓ la mécanique Newtonienne
- ✓ la théorie de l'électromagnétisme de Maxwell
- ✓ la thermodynamique

2 grands principes sont les fondements de la thermodynamique :

- ✓ la conservation de l'énergie
- ✓ toute forme d'énergie à 2 sources peut non seulement être utilisée pour augmenter l'énergie calorifique d'un récepteur à partir d'une source d'entropie à température inférieure mais aussi à partir de la source universelle à zéro degré absolu

La thermodynamique distingue deux types de phénomènes :

- ✓ phénomènes réversibles (collision élastique de 2 sphères)
- ✓ phénomènes irréversibles (détente d'un gaz dans le vide)

Toutes les lois de la nature connues (Maxwell , Newton , ...) étant réversibles , le problème fut de trouver le lien entre réversibilité et irréversibilité , ce qui donnera naissance à la mécanique statistique (notamment Boltzmann).

La notion de probabilité fait alors son apparition dans la physique et l'entropie se traduit désormais dans ce cas par la fonction de probabilité de l'état du système étudié.

# Le corps noir

*Corps noir : absorbe tout le rayonnement électromagnétique et émet un rayonnement où toutes les fréquences sont présentes. Les parois du corps noir émettent et absorbent en permanence du rayonnement jusqu'à ce qu'un équilibre soit atteint. A chaque  $T^\circ$ , le rayonnement possède une répartition spectrale bien déterminée.*

Les travaux sur les spectres d'émission profonde (Balmer et Bohr) et l'observation du spectre solaire (Kirchhoff) influencent les prémices de la physique quantique, mais conduisent rapidement au problème du corps noir formulé par Kirchhoff :

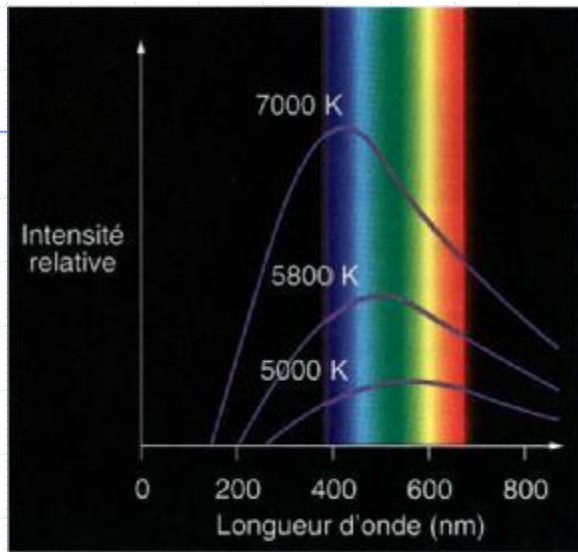
- ✓ comment expliquer les diverses couleurs et la distribution d'énergie de lumière émise par des sources différentes ?
- ✓ quel est le spectre d'émission d'un corps ?

Maxwell puis Hertz => des charges en mouvement oscillent et produisent un champ  $\epsilon\mu$  ; cette radiation se comporte comme une radiation lumineuse !

Le caractère ondulatoire du rayonnement  $\epsilon\mu$  est donc bien établi et le modèle de l'oscillateur peut servir de point de départ ...

Le spectre lumineux est continu , la fréquence de la lumière émise dépendant de la fréquence de vibration des charges électriques.

- ✓ le spectre continu peut être observé de l'IR => UV par décomposition par un prisme de lumière solaire ou émise par un corps incandescent
- ✓ tous les corps portés à même  $T^\circ$  émettent de la lumière avec la même configuration quelque soit leur composition chimique
- ✓ la courbe est identique quelque soit le corps ; le pic se déplace avec la  $T^\circ$

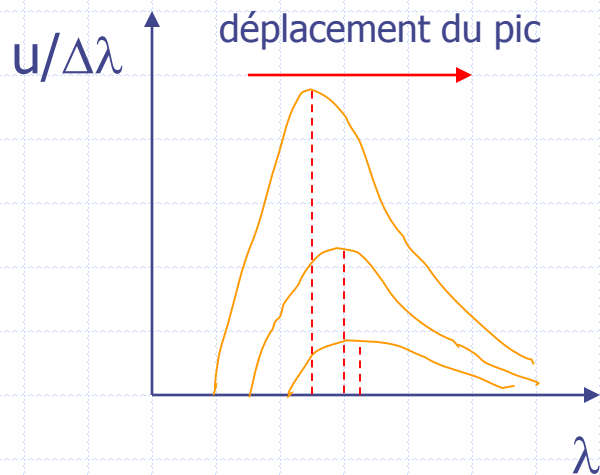


Trois spectres de corps noir.

Le spectre du haut correspond à une température de 7000 K ; le pic d'émissivité est à 414 nm (bleu-violet).

Le spectre du milieu correspond à la température de la surface du Soleil, 5800 K ; le pic d'émissivité est à 500 nm (vert).

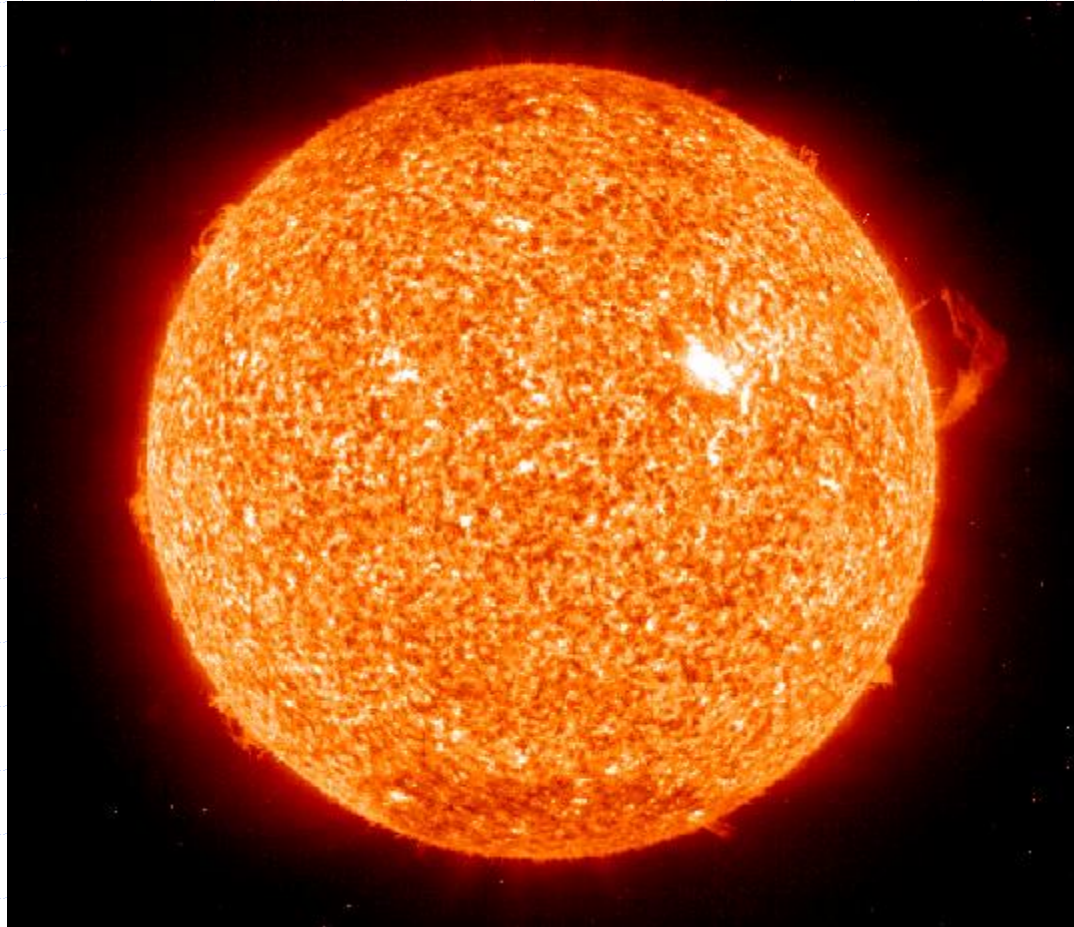
Le spectre du bas correspond à une température de 5000 K ; le pic d'émissivité est à 580 nm (vert-jaune).





Nous pouvons donc établir la  $T^\circ$  d'astres lointains !  
En effet ,  $\lambda_{(\text{pic})} \cdot T(\text{K}^\circ) \sim 0.0029 \text{ m} \cdot \text{K}^\circ$  (loi de Stefan)

Exemple : le Soleil



$\lambda_{(\text{pic})} \sim 5,5 \cdot 10^{-7} \text{ m}$       soit  $T^\circ \sim 5300$

Le problème est de trouver la densité spectrale d'énergie du rayonnement pour une fréquence donnée !!!

Cette fonction  $u(\nu, T)$  doit être universelle, c'est à dire indépendante de la composition chimique ...

Stefan démontre de manière empirique que  $\nu$  est proportionnelle à  $T^4$ .  
Boltzmann, par des considérations thermodynamiques et à partir des équations de Maxwell, démontre que  $u = a \cdot T^4$

Enfin Wien pose :  $u = \nu^3 \cdot f(\nu/T)$ , et l'on retrouve Stefan :  $\lambda \cdot T = \text{cste}$

Le problème est de déterminer la forme de la fonction  $f(\nu/T)$  !

Planck reprend le modèle de l'oscillateur de fréquence  $\nu$  ; il considère qu'à l'équilibre ,

*énergie émise par radiation par oscillateur par seconde*  
*= travail exercé par le champ de radiation sur l'oscillateur*

Finalement ,  $u(\nu, T) = \frac{8 \cdot \pi \cdot \nu^2}{c^3} \cdot \langle \epsilon \rangle$

Si nous connaissons  $\varepsilon$  , nous connaissons la densité spectrale.  
La mécanique statistique nous enseigne que l'équipartition de l'énergie donne :  $\langle \varepsilon \rangle = kT$

D'où , la catastrophe de l'UV !!!

En effet , avec  $u(\nu, T) = \frac{8 \cdot \pi \cdot \nu^2}{c^3} \cdot kT$  (Rayleigh-Jeans),

si on calcule la densité d'énergie totale , elle serait infinie , ce qui est une absurdité !

D'autre part , la fonction ne montre aucun maximum ...

Conclusion : pour les petites fréquences , l'accord avec Wien (thermo + Maxwell) est certain , mais non pour les hautes fréquences !

Hypothèse de Planck :

l'énergie des oscillateurs ne peut être continue mais discrète !

$$u(\nu, T) = \frac{8 \cdot \pi \cdot \nu^2}{c^3} \cdot \frac{\epsilon_0}{e^{\beta \epsilon_0} - 1} \quad \text{avec } \beta = 1/kT$$

Wien impose que  $\nu^2 \cdot \epsilon_0 \sim \nu^3$  et par conséquent ,  $\epsilon_0 = h\nu$  (h cste de Planck)

Donc :

$$u(\nu, T) = \frac{8 \cdot \pi \cdot \nu^2}{c^3} \cdot \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

Pour  $\nu$  petit :  $u \sim \frac{8 \cdot \pi \cdot \nu^2}{c^3} \cdot kT$  Rayleigh-Jeans

Pour  $\nu$  grand :  $u \sim \frac{8 \cdot \pi \cdot \nu^2}{c^3} \cdot h\nu \cdot e^{-h\nu/kT}$  Wien

# Le photon

L'hypothèse de Planck est révolutionnaire , mais la signification profonde est due à Einstein.

Planck utilise le modèle des oscillateurs matériels pour décrire le processus d'interaction matière  $\leftrightarrow$  radiation , mais il est convaincu que la radiation dans la cavité est décrite par les équations de Maxwell.

Einstein étudie alors la limite de Wien (corps noir dans la région la plus quantique).

Les arguments sont à nouveau thermodynamiques :

*variation de densité d'entropie par Planck*

*= variation d'entropie pour un gaz de particules libres (GP)*

$$\text{D'où } \Delta S = k \cdot \ln(V/V_0)^{U/h\nu} = k \cdot \ln(V/V_0)^n$$

Einstein en conclut que l'égalité est valable lorsque :  $U = nh\nu$  !!!  
Lorsque  $h\nu \gg kT$  (petite valeur de densité d'énergie) , l'entropie de la radiation se comporte comme si celle-ci était un gaz de particules (photons) d'énergie:  $E = h\nu$

=> la radiation est quantifiée

Cette conclusion est plus radicale que celle de Planck ; il est clair qu'à l'époque , la radiation  $\epsilon_\mu$  a un caractère ondulatoire indéniable (Maxwell , diffraction , interférences , ...)

# L'effet photoélectrique

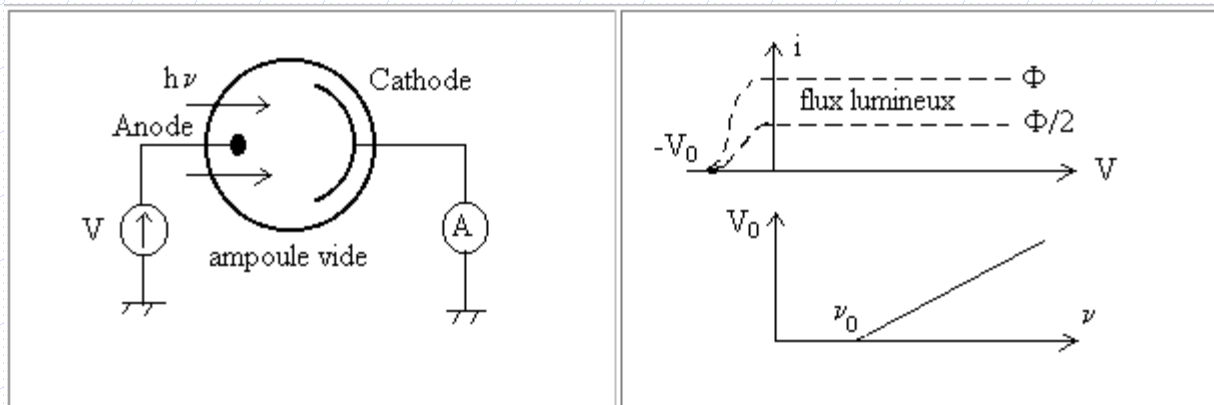
De la lumière UV sur une plaque métallique dans le vide engendre une émission d' $e^-$ .

L'interprétation donnée par Einstein fait appel à la collision inélastique d'un photon sur les électrons libres du métal (cathode).

Le photon est absorbé par l'électron :

$$h\nu = h\nu_0 + \frac{1}{2}mv^2$$

$W_0 = h\nu_0$  est l'énergie nécessaire pour extraire un électron libre du métal.



Lorsqu'un électron sort du métal , il est retenu par les charges positives du métal.

Cette énergie d'extraction est faible , toujours inférieure à l'énergie d'ionisation d'un atome du métal : il s'agit bien d'électrons libres.

Il n'y a pas d'émission secondaire de lumière ce qui prouve que le photon incident est absorbé.

Si  $\nu < \nu_0$  , pas de courant quelque soit le potentiel

Si  $\nu > \nu_0$  , possibilité d'arrêter le courant électrique en portant l'anode à un potentiel négatif  $-V_0$  tel que :  $V_0 = h(\nu - \nu_0)/e$

pour un potentiel  $V$  positif croissant , le courant de saturation est proportionnel au flux lumineux (# photons).

*Résultats :*

- l' $E_c$  des  $e^-$  ne dépend pas de l'intensité du courant
- l'intensité du courant émis dépend de l'intensité de radiation
- l' $E_c$  ne dépend que de la fréquence de radiation

Einstein :

la radiation est composée de photons et  $E_c = h\nu - A$

( $A$  = énergie d'extraction , dépend du matériau)



## Coefficients d'Einstein

Einstein donne une autre démonstration de la loi de Planck.

Considérons l'émission et l'absorption de la lumière par le corps noir.

Les atomes des parois (oscillateurs de Planck) sont dans des états d'énergie différents, mais leur distribution est gouvernée par la loi de Boltzmann :

$$n_1/n_2 = e^{-(E_1-E_2)/kT}$$

Un atome de la population (1) tel que  $E_1 > E_2$ , émet spontanément de la radiation, perd de l'énergie et se retrouve à l'état (2) si :

$$E(\text{émise}) = E_1 - E_2 \text{ avec } \nu = (E_1 - E_2)/h$$

*Émission spontanée* : on admet que la loi qui régit l'émission spontanée est équivalente à une loi de décroissance radioactive.

*Émission stimulée* : provoquée par la présence du rayonnement dans l'enceinte ; le photon est susceptible de provoquer la désexcitation d'un atome à l'état excité ; celui-ci revient à son état fondamental en émettant un photon identique, c'est à dire même phase, même polarisation, même direction de propagation.

Hypothèse fondamentale : les atomes et le rayonnement sont en équilibre thermique ,

$$d(\#atomes (1) \text{ émission spontanée} + \text{émission induite}) \\ = d(\#atomes (2) \text{ absorption})$$

Autrement dit ,

$$n_1 \cdot [A + B_{12} \cdot u(\nu, T)] = n_2 \cdot B_{21} \cdot u(\nu, T)$$

lorsque  $T \rightarrow \infty$  ,  $u$  est très grand , donc  $A \ll B_{12}$  , d'où  $B_{12} = B_{21} = B$ .

Ainsi ,

$$u(\nu, T) = \frac{A}{B} \cdot \frac{h\nu}{e^{-(E_1 - E_2)/kT}}$$

D'après Wien ,  $A/B \sim \nu^3$  et  $E_1 - E_2 \sim \nu$

D'après Rayleigh-Jeans , lorsque  $h\nu \ll kT$  ,  $A/B = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3}$

Et l'on retrouve :

- ✓ la loi de Planck en utilisant une méthode différente
- ✓ la loi de Bohr  $E_1 - E_2 = h\nu$  , différence d'énergie entre deux niveaux d'un oscillateur (atome)

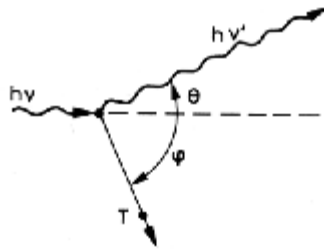
# Effet Compton

Confirmation la plus directe du caractère corpusculaire de la radiation.

La lumière peut être vue pour certains processus comme une collection de grains, les corpuscules ayant une énergie  $E = h\nu$ .

Dans le cadre de la relativité restreinte, cela implique que :  $E = pc$ .

L'échange d'énergie entre lumière et atomes ou électrons se fait par quanta.



**Figure:** Cinématique de la diffusion Compton.

Le photon incident interagit avec un électron, mais cet électron a une énergie de liaison beaucoup plus faible que celui impliqué dans l'effet photoélectrique.

L'électron cible est expulsé dans une direction donnée: c'est l'électron Compton. Le photon incident est quant à lui, diffusé dans une direction qui fait un certain angle avec la direction de l'électron Compton. Lorsque l'énergie du photon incident croît, l'énergie emportée par l'électron Compton devient de plus en plus importante par rapport à celle du photon diffusé.

## A retenir

L'aspect corpusculaire ou quantique du photon intervient lorsqu'il y a échange d'énergie entre matière et rayonnement.

L'aspect ondulatoire se manifeste dans les phénomènes d'interférences et de diffraction.

Ces deux aspects coexistent toujours mais ne se manifestent jamais simultanément !

# Chaleur spécifique des solides

Deux ans plus tard (1907), Planck trouve une confirmation de sa formule pour l'énergie moyenne d'un oscillateur dans le calcul de la chaleur spécifique des solides.

Le problème trouve son origine dans une série de résultats expérimentaux :

*À haute  $T^\circ$ , tous les solides ont une chaleur spécifique molaire approximativement égale à  $6 \text{ cal}/^\circ\text{K} \Rightarrow$  loi de Dulong-Petit*

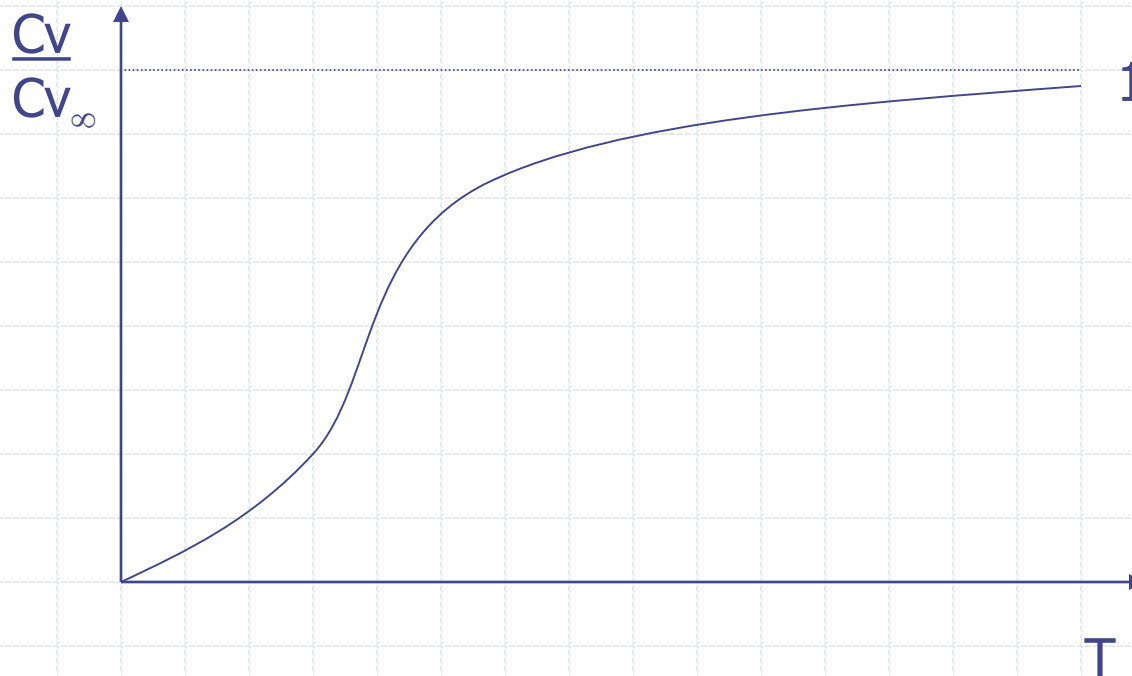
Pourtant, l'expérience montre qu'il existe des déviations à cette loi :

- ✓ à basse  $T^\circ$
- ✓ pour des solides très durs (ex : diamants), c'est à dire pour des vibrations atomiques faibles

Einstein suppose que l'ensemble des oscillateurs obéissent à la loi de Planck.

$h\nu$  : quantum d'énergie de vibration d'un oscillateur (atome).  
Si l'atome est très solidement attaché à sa position d'équilibre,  $h\nu$  grand (force de rappel grande => grande  $\nu$  de vibration).

- $h\nu \ll kT$  (hite  $T^\circ$ , liaison faible) :  $U \sim 3RT$
- $h\nu \gg kT$  (basse  $T^\circ$ , liaison forte) :  $U \sim 3RT \cdot \frac{h\nu}{kT} \cdot e^{-h\nu/kT}$



Debye soutient qu'il est incorrect de considérer que N atomes oscillent indépendamment les uns des autres à même  $T^\circ$  ; ceux-ci sont fortement couplés !

L'idée est la suivante : les fréquences propres de vibration du solide (observée macroscopiquement : ex => propagation du son) trouvent leur origine dans les fréquences de vibration des atomes pris individuellement.

Il faut donc compter le nombre de modes de vibration dans un intervalle de fréquence  $dv$ .

Finalemment :

$$U = 3NkT \cdot \frac{3}{x_m^3} \int_0^{x_m} dx \cdot x / (e^x - 1) \quad , \quad \text{avec } x_m = hv_m/kT = \theta / T$$

↓
↓
↓

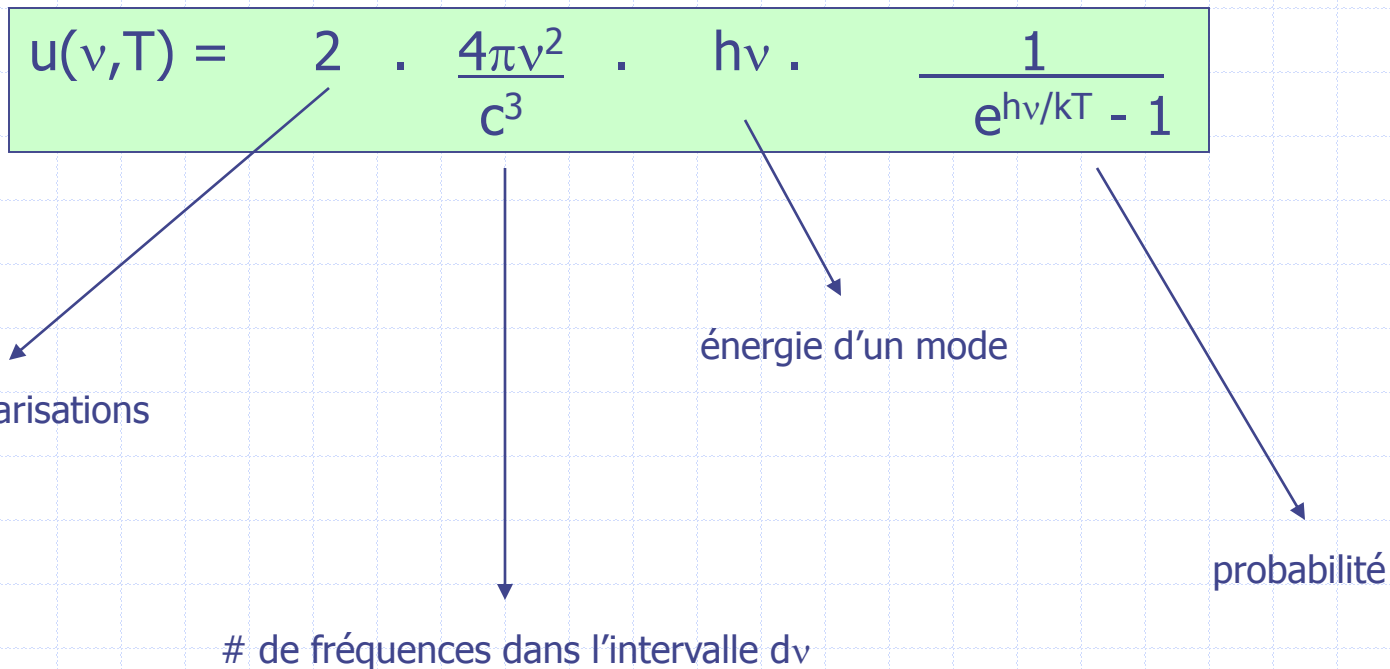
résultat classique
correction
t° de Debye

À  $T \rightarrow 0$  ,  $x_m \rightarrow \infty$  et  $U \sim T^4$  ,  $Cv \sim T^3$  , confirmés par l'expérience

## Retour à Planck

sa démonstration était basée sur une partie classique ( $\delta E$  et  $\delta W$ ) et une partie quantique.

Si l'on procède pour le champ  $\epsilon\mu$  de la même manière que pour la quantification des ondes de vibrations élastiques, alors :

$$u(\nu, T) = 2 \cdot \frac{4\pi\nu^2}{c^3} \cdot h\nu \cdot \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$


# de polarisations

# de fréquences dans l'intervalle  $d\nu$

énergie d'un mode

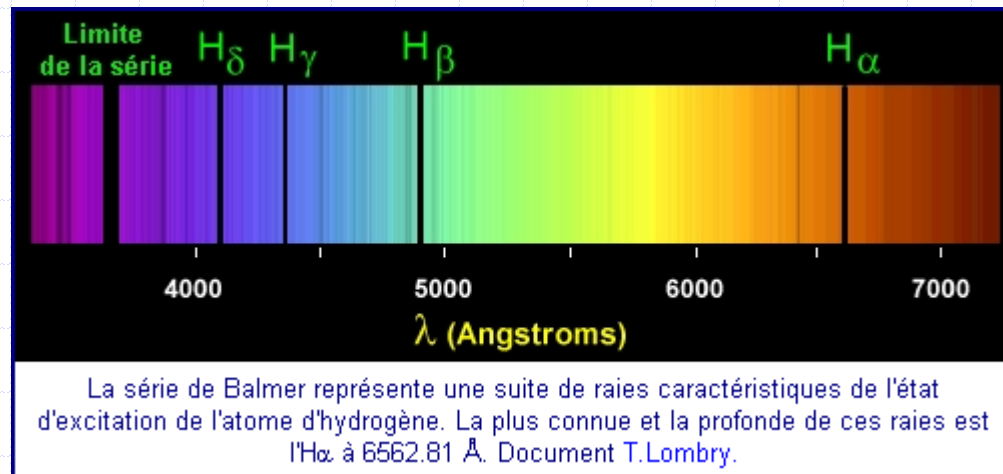
probabilité



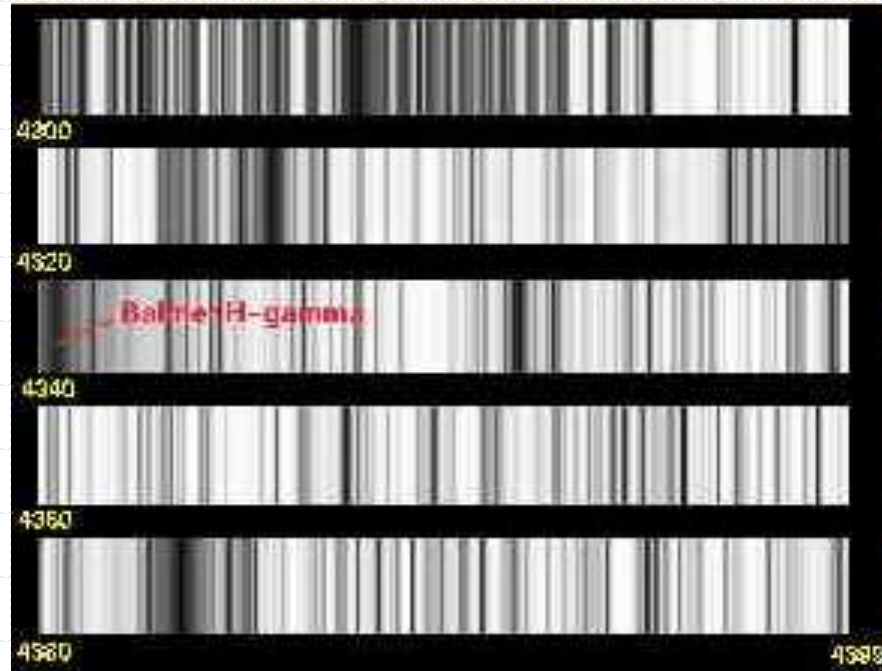
# Le spectre des atomes

Mais quel est le modèle physique précis qui décrit ces oscillateurs ?  
Il manque une théorie de l'atome, des niveaux d'énergie, du spectre d'émission.

Une série d'études spectroscopiques (Kirchhoff, Bunsen) montre que la lumière émise par les gaz met en évidence l'existence d'un spectre discret.



Nous voyons le résultat de l'absorption de la lumière de fréquence correspondante par un gaz interposé entre l'émetteur et l'observateur.



une petite partie du spectre d'émission du soleil

Aucune explication satisfaisante du spectre d'émission ne semble découler des lois de la physique classique.

Balmer (1885) remarque une régularité et trouve une formule empirique pour H qui sera ensuite généralisée, en faisant l'hypothèse que cette formule est valable pour des  $n > 6$  ( $H_\delta$ ), c'est à dire dans l'UV et que d'autres séries doivent exister :

$$1/\lambda = R(1/n^2 - 1/n'^2) \quad \text{avec } n' > n$$

Atome de Bohr :

Le problème avec le modèle planétaire de Rutherford est le suivant : pour un électron sur une orbite donnée, il faut que

$$\textit{force centrifuge} = \textit{force électrostatique}$$

mais un électron accéléré doit perdre progressivement son énergie par émission d'un spectre continu de radiation et finalement tomber sur le noyau.

Bohr pense qu'il faut abandonner tout ce qui dans la physique classique a échoué dans l'explication du spectre des atomes.

Ses postulats sont les suivants :

- ✓ les orbites libres des électrons autour du noyau sont circulaires et stables mais seul un nombre limité d'orbites est possible
- ✓ l'atome ne peut exister que dans un certain nombre d'états stationnaires ou états quantiques ayant chacun une énergie bien déterminée => l'énergie de l'atome est quantifiée
- ✓ l'atome peut rester dans un état d'énergie stationnaire ; dans cet état , le moment angulaire  $J$  d'un électron est tel que :  
 $J = n\hbar$  ,  $n$  est appelé nombre quantique  
cette condition quantifie les mouvements de l'électron autour du noyau ; sur une orbite permise , l'électron ne rayonne pas
- ✓ au cours de la transition entre 2 niveaux d'énergie , il y a émission ou absorption d'un photon , les seules fréquences susceptibles sont :  $\nu_{nm} = |E_n - E_m|/h$  (prédiction d'Einstein)

En outre , ce modèle expose que (dans le cadre de l'atome H):

✓ la vitesse , le rayon et l'énergie sont des grandeurs quantifiées

ex :  $E = -13.5/n^2 \text{ eV}$

✓ en présence de rayonnement lumineux , un atome est excité ; le retour à l'état initial s'effectue par émission d'un photon dont la fréquence est :

$$\Delta E = h\nu = 13.5(1/n^2 - 1/m^2) \text{ eV}$$

✓ la quantification du moment angulaire permet de trouver l'expression du niveau d'énergie  $E_n$  :

$$E_n = - e^4/2n^2\hbar^2$$

et de rétablir ainsi  $\Delta E$  !

Problème : l'atome de Bohr permet d'introduire l'idée de quantification et de retrouver les résultats expérimentaux de Balmer sur le spectre de H , mais il est fondé sur la notion de trajectoire incompatible avec la mécanique quantique et échoue dans l'explication des raies des spectres des autres atomes !!!

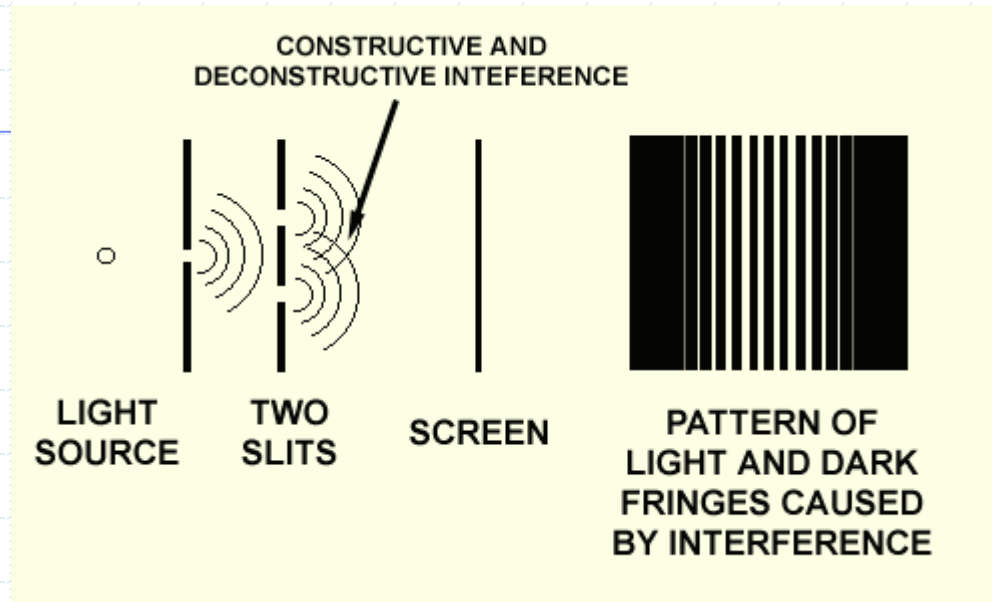
De Broglie attribue la dualité onde-corpuscule aux particules matérielles.

À chaque particule d'impulsion  $p$  on associe une longueur d'onde  $\lambda$  telle que :

$$\lambda = h/p \quad \text{et} \quad \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$$

Afin de faire le lien entre le modèle de Bohr et la longueur d'onde de De Broglie et ainsi mettre en évidence le caractère ondulatoire des électrons , Feynman imagina une expérience :

## Expérience de Feynman et fentes de Young :



Une source émet des quantons .

Cette source est monochromatique : les quantons ont même énergie , donc même fréquence.

Elle les émet un par un ; la plaque est percée de 2 fentes.

Si l'on bouche l'une des deux fentes , le résultat classique prévisible est vérifié : accumulation de quantons du côté de la fente ouverte.

Dans le cas où les deux fentes sont ouvertes , on observe les franges d'interférences , avec un pic au centre.

Les quantons se sont comportés comme des ondes.

Problème : ils ont été envoyés un à un ; or , le quanton n'a pu interférer avec un autre quanton ; il n'a pu interférer qu'avec lui-même !

Le quanton est donc passé par les deux fentes à la fois !

*Il est simultanément dans toute une série d'états possibles.*

C'est le principe de non-localité (don d'ubiquité).

Feynman pousse le problème jusqu'à placer des détecteurs derrière chaque fente avant que le quanton n'atteigne l'écran ...

Le quanton est toujours détecté derrière l'une des deux fentes , jamais les deux à la fois , mais en même temps , la figure d'interférences est détruite !

Un détecteur aléatoire provoquerait les mêmes résultats suivant son état .  
Tout se passe comme si les quantons « savaient » avant leur passage dans la fente s'ils seront observés !

*C'est l'observation qui crée la réalité.*



## Relations d'incertitude de Heisenberg :

○ Si la position de l'électron est connue avec précision , nous savons par quel trou il est passé : son comportement naturel (libre) est perturbé. Il n'existe pas de détecteur suffisamment délicat pour déterminer par quel trou l'électron est passé sans détruire complètement la figure d'interférences.

✓ à tout événement est associé un nombre complexe appelé amplitude de probabilité  $\Phi$  ; la probabilité est donnée par  $P = |\Phi|^2$

✓ s'il existe plusieurs chemins pour un événement donné , on applique le principe de superposition :  $P = |\Phi_1 + \Phi_2 + \dots + \Phi_n|^2$   
si des données permettent de déterminer quelle voie est empruntée alors :  $P = \Phi_1 + \Phi_2 + \dots + \Phi_n$

✓

$$\Delta x. \Delta p \sim \hbar$$

# Premiers principes de la mécanique quantique

- i.  $P = \Phi\Phi^* = |\Phi|^2$
- ii. principe de superposition :  $P = |\Phi|^2 = |\Phi_1 + \Phi_2 + \dots + \Phi_n|^2$
- iii. lorsqu'il est possible de déterminer suivant quelle voie un événement se produit,  $P = \sum P$  associées à chaque voie indépendante
- iv. principe de complémentarité (Bohr) : ondes – particules => impossibilité de décrire les résultats d'une expérience de mécanique quantique en utilisant simplement les concepts classiques  
autre point de vue : on ne peut observer simultanément les aspects ondulatoires et corpusculaires.

v. principe de correspondance (Bohr) : résultats classiques découlent des résultats quantiques dans une certaine limite ( $\hbar \rightarrow 0$ ).

vi. principe d'incertitude (Heisenberg)

vii. réduction de la fonction d'onde ou principe de Von Neumann : juste après une mesure , le système est dans l'état donné par la mesure

## Notion de paquet d'ondes

Une onde correspond à une amplitude de probabilité (voir expérience Feynman)

Soit l'onde plane :  $\psi = e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x}-\omega t)}$

Sa probabilité de présence est donc indépendante de  $\mathbf{x}$  (Heisenberg).

Afin de décrire avec une onde une particule relativement bien localisée, introduisons le « paquet d'ondes » de telle sorte que  $\Phi(x,t)$  soit nulle presque partout :

$$\psi(x,t) = \int d^3k. e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x}-\omega(k)t)} f(\mathbf{k})$$

Où la fonction d'onde  $\psi$  est-elle différente de 0 de manière substantielle ?

Ceci est déterminé par le comportement de la phase  $\Phi = \mathbf{k}\mathbf{x} - \omega(k)t$ .

L'extremum se trouve dans le voisinage de  $k_0$ .

On trouve  $\mathbf{x} - \mathbf{vt} = \mathbf{0}$ .

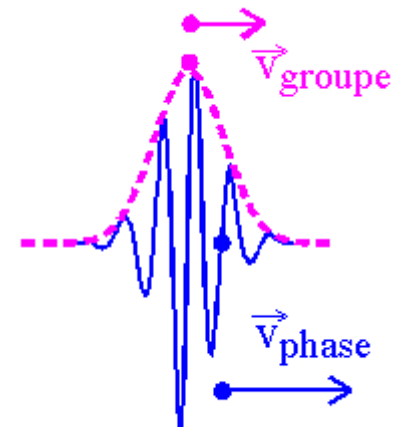
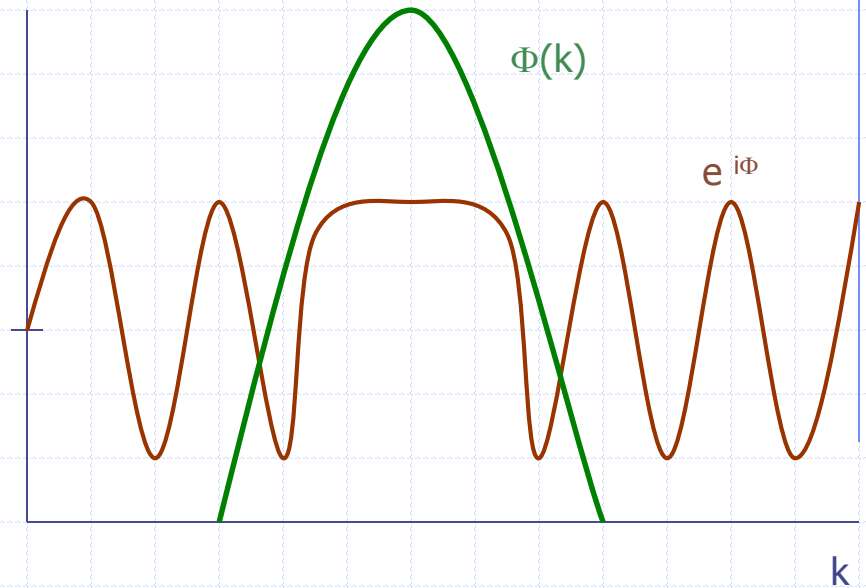
La région où l'intégrale est non nulle se déplace avec une vitesse dite vitesse de groupe :

$$v = d\omega/dk$$

Pour une onde plane ,  $v = d\omega/dk = dE/dp = d(p^2/2m)/dp = p/m$

Par contre , la vitesse de phase est :

$$v = \omega/k = p/2m !!!$$



# Équation de Schrödinger

En 1926 , Schrödinger écrit l'équation qui décrit l'évolution de la fonction d'onde (amplitude de probabilité) associée à une particule non relativiste.

Le problème réside dans les niveaux d'énergie discrets (bien qu'une analogie existe dans l'équation d'onde du corps noir).

Partant de :  $P(\mathbf{x},t) = \psi^*(\mathbf{x},t) \psi(\mathbf{x},t) = |\psi(\mathbf{x},t)|^2$

Les conditions auxquelles  $P(\mathbf{x},t)$  doit satisfaire sont :

- i.  $P(\mathbf{x},t) \geq 0$  (positivité)
- ii.  $d/dt. \int d^3\mathbf{x}.P(\mathbf{x},t) = 0$  (conservation)
- iii.  $\int d^3\mathbf{x}.P(\mathbf{x},t) = 1$  (normalisabilité) , ce qui revient à dire qu'à tout instant , la particule se trouve quelque part !

Le principe de superposition généralise la fonction d'onde :

$$\psi(\mathbf{x},t) = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{2\pi^{3/2}} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x}-\omega(\mathbf{k})t)} f(\mathbf{k})$$

$\omega = \omega(\mathbf{k})$  relation de dispersion

or ,  $v_g = \partial\omega/\partial\mathbf{k} = \partial E/\partial\mathbf{p}$

à la limite classique ,  $v=p/m$  d'où  $E = p^2/2m$

cela fixe la relation de dispersion (principe de correspondance):

$$\omega = \hbar|\mathbf{k}|^2/2m$$

La position du paquet d'onde dans l'espace est donc donnée par Newton pour une particule libre ; cette condition fixe le déplacement du centre du paquet d'ondes mais ne dit rien sur l'étalement au cours du temps !

Finalement :

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

Pour une particule d'énergie déterminée  $E$ , De Broglie nous dit qu'il faut associer à cette particule l'onde de fréquence :

$$v = \hbar\omega \text{ telle que } E = \hbar\omega$$

La dépendance dans le temps est gouvernée par  $e^{i\omega t}$  et donc :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = E \psi(\mathbf{x}, t)$$

De manière analogue, la dépendance spatiale est gouvernée par  $e^{ikx}$  et donc :

$$E \psi = - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi$$



*Équation de Schrödinger indépendante du temps*

L'équation de Schrödinger admet en général des solutions qui ne correspondent pas à une énergie déterminée.

Les solutions découlent directement du principe de superposition et de l'hypothèse de De Broglie.



En présence d'un potentiel :

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

Dans le cas où il y a une interaction  $V$ , on suppose que les solutions qui n'ont pas une énergie déterminée sont également valables  
=> perturbations.

## Un peu de terminologie et de formalisme en mécanique quantique :

les raisonnements diffèrent totalement des théories pré-existantes : les systèmes ne sont pas représentés par leurs caractéristiques concrètes, mais par un vecteur d'un espace hilbertien, c'est à dire un objet mathématique dont on va déduire des résultats concrets (combinaisons linéaires).

Les résultats d'une mesure sont décrites par des observables, qui sont donc des opérateurs hermitiques diagonalisables.

On ne prévoit pas le résultat d'une mesure, mais la probabilité des divers résultats.

La mesure perturbe le système, car le vecteur d'onde d'un système est modifié lors de l'application d'une observable.

$E \psi = H \psi$  : équation aux valeurs propres

$H$  : opérateur = énergie en mécanique quantique =>  
hamiltonien

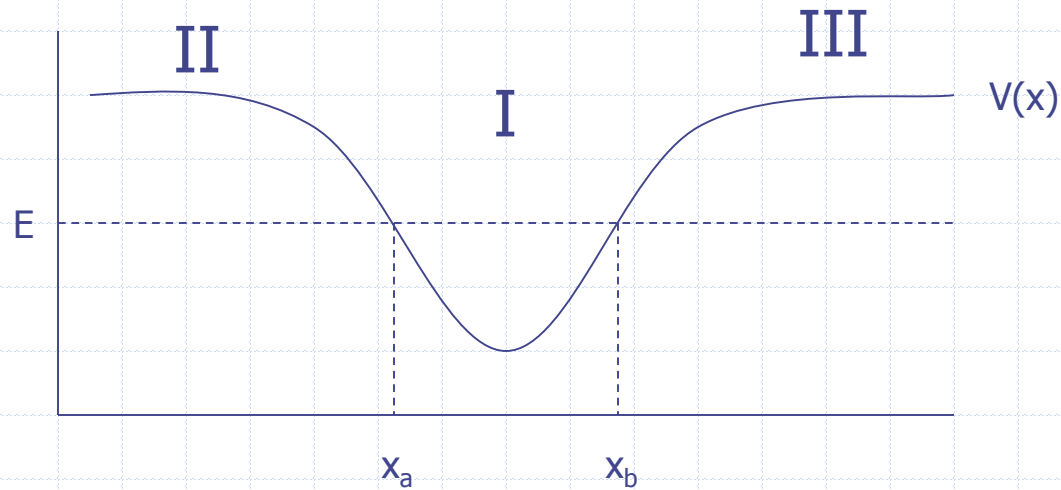
$E$  : valeur propre

$\psi$  : fonction propre

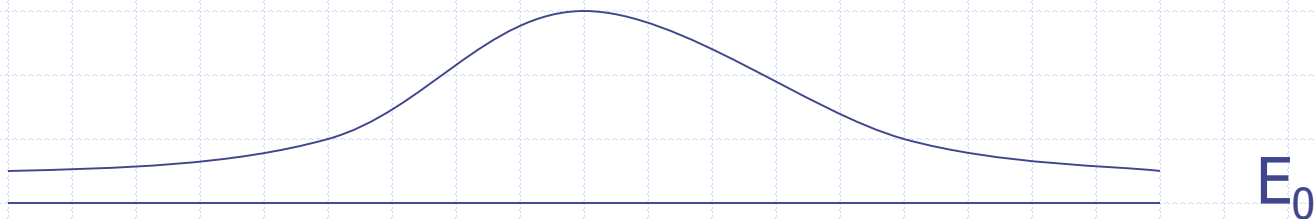
Les valeurs propres de l'hamiltonien sont donc les différentes énergies accessibles au système dans un état stationnaire.

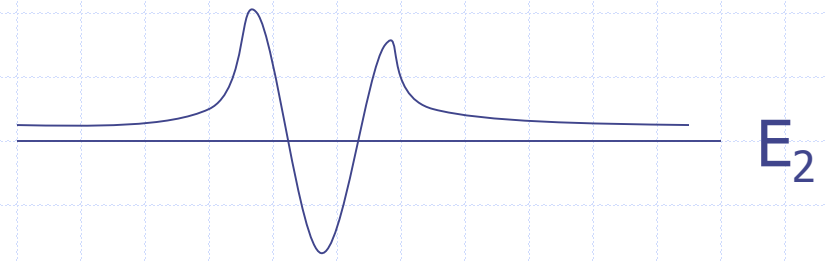
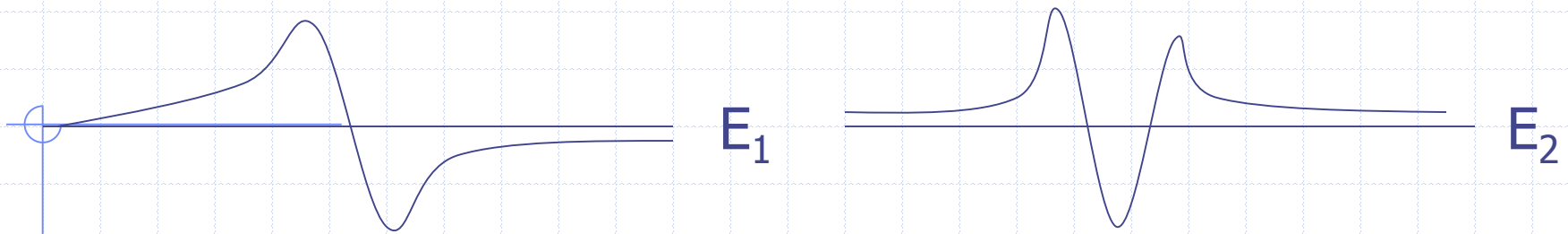
# Mise en évidence de la quantification des niveaux d'énergie (Bohr) dans une solution à une dimension ...

Soit le puits de potentiel :



Les solutions acceptables pour les fonctions d'ondes ont comme valeurs propres les énergies suivantes :





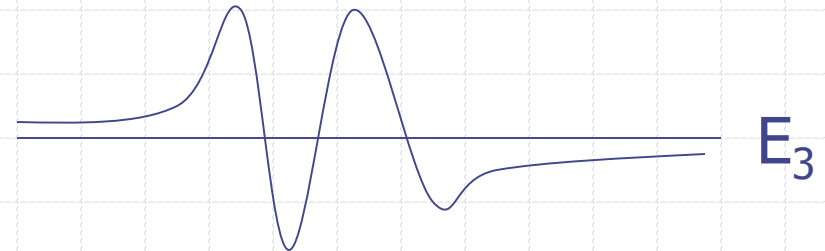
$E_0$  correspond à l'état fondamental ,

$E_1$  premier état excité

$E_2$  deuxième état excité

$E_3$  troisième état excité

...



Les valeurs de  $E$  dépendent de la forme du potentiel , ainsi que le nombre éventuel d'états excités.

La caractéristique fondamentale de toutes les solutions est que la particule a une probabilité non nulle de se trouver en dehors de la région classiquement admise !

## La mécanique quantique selon Feynman :

En établissant l'équation de diffusion qui régit la marche aléatoire par une intégrale de chemins , Feynman a retrouvé l'équation de Schrödinger.

Feynman a prouvé qu'il était possible d'assigner un nombre à chacun des chemins , de sorte que leur moyenne pondérée conduise exactement à la même valeur pour la probabilité que celle calculée avec la fonction d'onde.

Il n'est pas nécessaire d'associer une onde de probabilité à l'électron.

La probabilité pour que l'électron arrive en un point choisi sur l'écran est le résultat de l'effet combiné de toutes les façons d'y arriver.



exemple de marche aléatoire à 2 dimensions

## *Mécanique classique =>*

la particule suit une trajectoire  $x(t)$  déterminée ; dans la formulation lagrangienne , l'équation du mouvement est obtenue à partir d'un principe variationnel , le principe de moindre action => la trajectoire classique correspond au minimum d'une fonction

$$S = \int L(t,x,x') \quad \text{appelée action.}$$

Il existe donc une fonction  $S$  qui dépend des trajectoires et qui prend sa valeur minimale précisément le long de sa trajectoire classique.

## *Mécanique quantique =>*

toutes les trajectoires sont possibles (la trajectoire classique n'est qu'une possibilité parmi elles) et contribuent à l'amplitude quantique.

C'est à la limite  $\hbar \rightarrow 0$  que la somme sur le chemin est dominée par la contribution de la trajectoire classique et que la fonction ( $S$ ) possède un maximum très élevé pour le chemin classique.

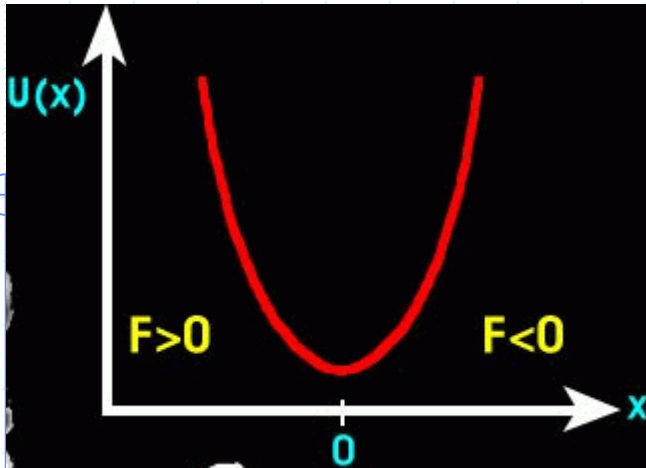
# L'oscillateur harmonique

*Systeme physique composé d'un point matériel de masse  $m$  qui oscille autour d'une position d'équilibre sous l'effet d'une force proportionnelle à l'éloignement.*

Cette notion est importante car :

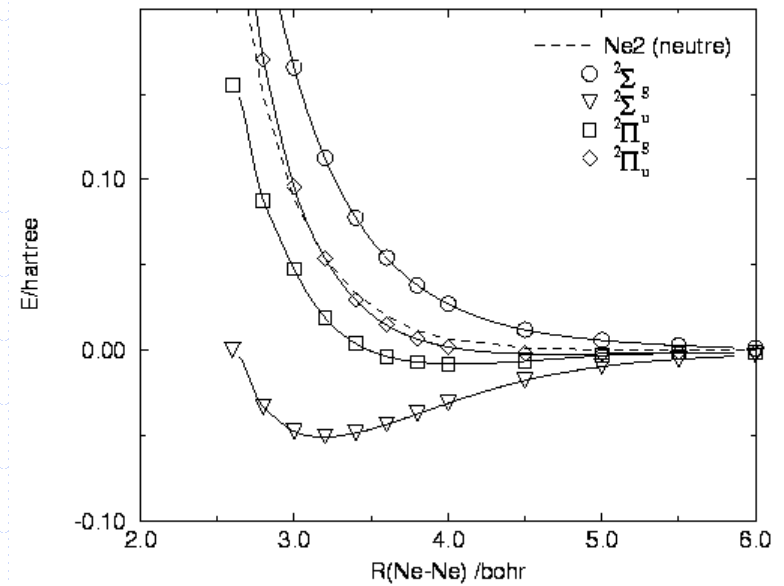
- le champ  $\varepsilon\mu$  se comporte comme un ensemble d'oscillateurs harmoniques (voir corps noir)
- un grand nombre de systèmes physiques se comportent approximativement comme des oscillateurs harmoniques (*ex : potentiel d'interaction de 2 atomes en fonction de leur séparation*)





## Oscillateur harmonique

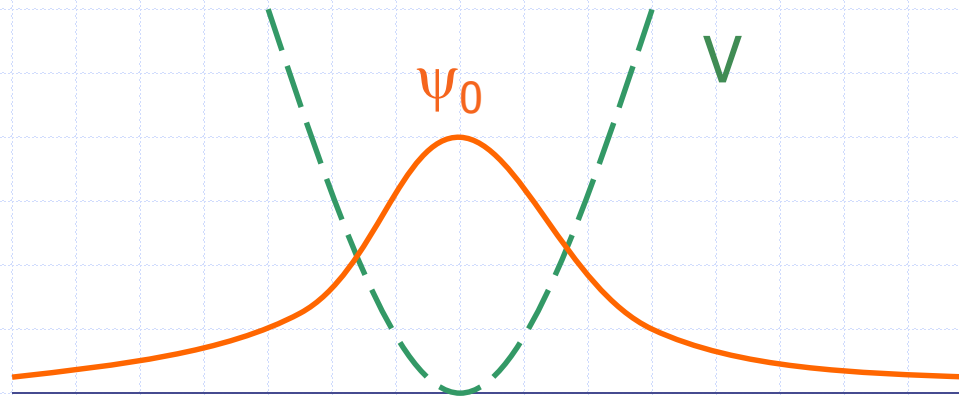
potentiel d'interaction Ne-Ne  
pour ses divers ions



Le potentiel est donc  $V(x) = K/2 \cdot x^2$

L'hamiltonien s'écrit donc :  $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{K}{2} x^2$

La résolution de l'équation aux valeurs propres nous donne les résultats suivants :



$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$E_n = (n+1/2) \hbar\omega$$

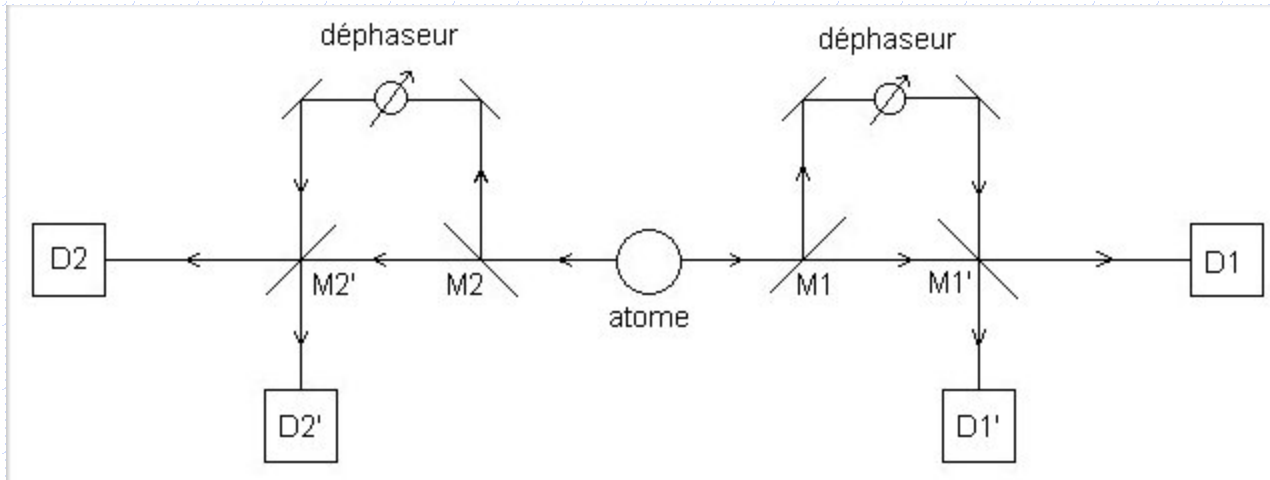
=> Planck !!!

On note l'existence d'une région interdite classiquement !!!

# Quelques exemples

## Paradoxe EPR

Einstein refusait de croire qu'une théorie fondamentale ait recours aux probabilités. Pour ce, il conçut une expérience imaginaire (avec Podolsky et Rosen) qui devait contredire un aspect de la mécanique quantique : l'enchevêtrement des particules.



L'enchevêtrement des particules permet que deux particules conservent un lien causal , peu importe la distance les séparant.

Ce qui advient à l'une des particules advient à l'autre avec une simultanéité parfaite.

Ceci implique que si l'on mesure les propriétés de l'une d'elles , on connaît automatiquement les propriétés de l'autre.

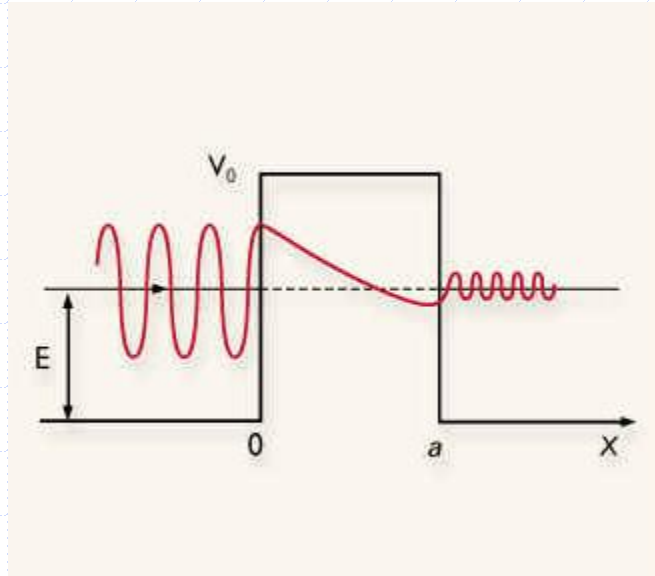
Les particules gardent donc un lien de communication instantanée.

Cela contredit la relativité restreinte qui impose qu'aucune communication ne peut dépasser  $c$ .

La relativité restreinte ne s'écroule pas pour autant , car il a été démontré que l'information ne peut être véhiculée par un tel enchevêtrement.

S'il existe une théorie permettant d'expliquer tous les domaines de la physique sans faire appel aux probabilités (théorie des variables cachées) , alors cette théorie ne peut pas être locale , car elle doit inclure le lien causal instantané.

## Effet tunnel



Soit la fonction d'onde ci-dessus confrontée à un puits de potentiel carré.

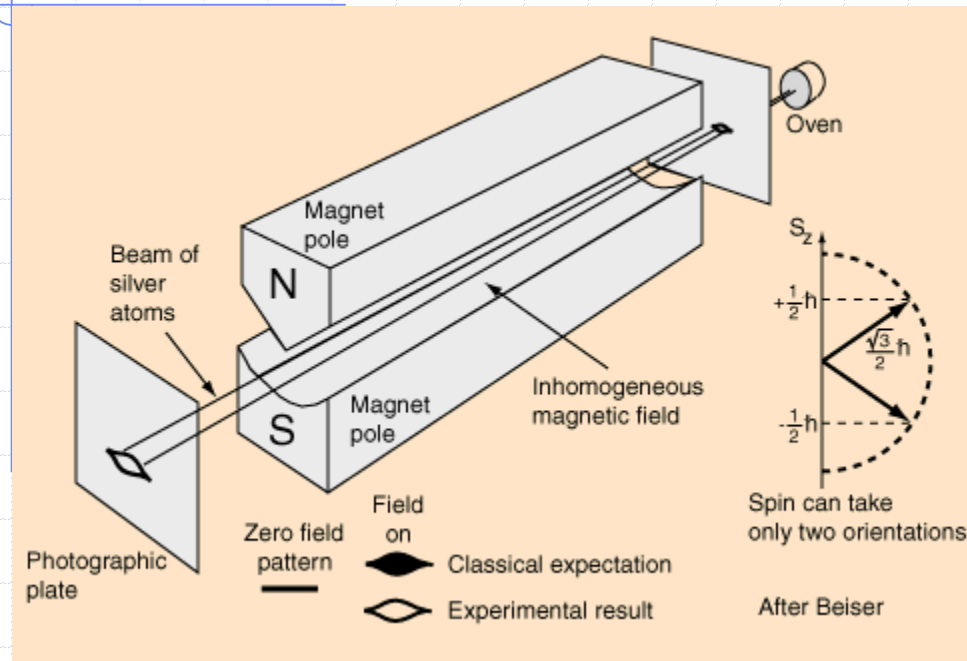
L'équation de Schrödinger nous dit que la probabilité de trouver une partie de cette fonction de l'autre côté de la barrière n'est pas nulle.

Nous ne pouvons pas expliquer de manière rationnelle comment la particule est passée , ni combien de temps cela a pris (la vitesse de l'effet peut parfois sembler supérieur à la vitesse de la lumière).

Le phénomène est rare , mais vérifié expérimentalement.

Une particule  $\alpha$  émise lors de la désintégration d'un noyau est bloquée dans le noyau par une barrière de potentiel due à l'interaction forte. Cependant , l'effet tunnel lui permet de s'échapper. Les isotopes se désintègrent d'autant plus facilement que la barrière de potentiel est faible.

# Expérience de Stern-Gerlach



En 1921, Stern et Gerlach font passer un faisceau d'atomes d'argent dans une région où règne un fort champ magnétique. Les atomes d'argent possèdent un moment magnétique.

Le champ étant n'ayant aucune orientation fixe , on s'attend à obtenir une tache continue sur l'écran correspondant au spectre continu des valeurs possibles dues à la projection du moment magnétique.

En fait , on observe uniquement deux taches.

Le moment magnétique des atomes ne prend en fait que deux valeurs possibles , l'une opposée à l'autre.

Chaque tache correspond à une valeur propre de l'observable moment magnétique.



## Chat de Schrödinger et conclusion

Cette expérience a été imaginée (et reste imaginaire) afin d'une part , de démontrer que la physique quantique échappe au sens commun , et d'autre part d'appréhender de manière simple (sans calculs) l'univers quantique.

La bizarrerie intervient dès que l'on veut prévoir le destin du chat. En effet , celui-ci est une combinaison de 50% de chat vivant et de 50% de chat mort.

Pourquoi au moment d'une observation , l'équation de Schrödinger cesse-t-elle d'être valable ?

Quelle est la cause de la réduction de la fonction d'onde ?

Le matériel de mesure ?

La conscience de l'observateur ?!!!

La mécanique quantique est axiomatique (Schrödinger non démontrée).

L'équation a d'abord été écrite , son sens « élucidé » ensuite.

Pourtant , la théorie n'a donné que des résultats parfaits !  
Les prédictions vérifiées par la suite ont été nombreuses.  
Les applications scientifiques et industrielles énormes.

Selon les scientifiques , plusieurs interprétations :

- la théorie quantique doit servir uniquement à faire des calculs et non à se poser des questions sur la nature de la réalité
- il n'y a pas de réduction : chaque état possible existe et est effectivement réalisé => théorie des univers multiples
- la question est liée à la gravitation => il faut qu'une certaine masse critique soit atteinte pour qu'il y ait réduction (Penrose)
- relativité d'échelle (Nottale)
- théorie des supercordes
- ...

# Bibliographie

- **Le Cours de physique de Feynman : mécanique quantique , *Feynman***
- **Mécanique quantique , *Cohen-Tanoudji***
- **Cours de physique théorique , *Landau-Lifchitz***
- **Cours de P.Windey , Laboratoire de physique théorique et hautes énergies , Paris VI**