

# PHYSIQUE QUANTIQUE

Malgré de très grands succès (la théorie de la gravitation universelle, la loi de Newton, l'électromagnétisme), il existe de nombreux phénomènes qui échappent à la description de la physique classique. Des faits expérimentaux révèlent plusieurs points importants :

- Pour certains phénomènes (p. ex. les phénomènes d'interférence et de diffraction), la lumière est une onde. Pour d'autres (p. ex. l'effet photoélectrique), c'est une particule : le photon.
- Des particules (comme l'électron, mais aussi le proton, le neutron, etc.) peuvent aussi donner lieu à des phénomènes de type ondulatoire.

Il nous reste maintenant à donner les caractéristiques des phénomènes lorsque l'on passe d'une nature (p. ex. la nature ondulatoire) à l'autre (la nature corpusculaire).

Cette étude montre qu'au regard de la classification des « objets » de la physique classique, certaines expériences trouvent leur interprétation dans un modèle ondulatoire de la lumière et d'autres dans un modèle corpusculaire de la lumière. C'est le sens qu'il convient de donner à la dualité « onde-particule ». Il faut souligner qu'il existe des situations expérimentales qui ne correspondent à aucune de ces deux images classiques. Soulignons que la physique quantique décrit les phénomènes de manière précise et unique, c'est l'interprétation des résultats qui change. L'onde détermine les propriétés statistiques de la particule, elle « guide » en quelque sorte la particule comme nous allons le voir. À l'aube du XX<sup>ème</sup> siècle, l'étude expérimentale des interactions entre la matière et le rayonnement électromagnétique va venir bouleverser ce tableau et conduire à l'émergence progressive d'une nouvelle théorie, la physique quantique, qui va concilier les aspects ondulatoires et particuliers de la matière et du rayonnement.



## CHAPITRE 1 :    **FONCTION D'ONDE ET EQUATION DE SCHRÖDINGER**

### Introduction

De façon imagée, la lumière est constituée de grain de particule appelé photon. L'énergie  $E_{ph}$  et la quantité de mouvement  $p_{ph}$  du photon sont des quantités indivisibles appelées respectivement quantum d'énergie et de quantité de mouvement. L'énergie  $E_{ph}$  est liée à la fréquence  $\nu$  de l'onde électromagnétique lumineuse associée au photon par la **relation de Planck-Einstein** :

$$E_{ph} = h\nu$$

où  $h = 6,62 \times 10^{-34} \text{ J.s}$  est la constante de Planck. Le photon est une particule relativiste pour laquelle  $E_{ph} = p_{ph}c$ , relation conduisant à :

$$p_{ph} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

où  $\lambda$  est la longueur d'onde dans le vide de l'onde électromagnétique lumineuse associée au photon.

En 1923, Louis de Broglie associe à toute particule matérielle un comportement ondulatoire. Ainsi à une particule de masse  $m$  et de vitesse  $v$ , on associe une onde de longueur d'onde  $\lambda$  donnée par la relation de de Broglie :

$$\lambda = \frac{h}{p} \text{ avec } p = mv$$

Cela a permis à Louis de Broglie de réinterpréter les niveaux d'énergie discrets de l'atome d'hydrogène par l'existence de modes d'ondes stationnaires : ce sont les ondes de matière. La physique ondulatoire a pour origine les travaux de Louis de Broglie. Pour étudier la propagation des ondes de matière, Erwin Schrödinger introduit un champ scalaire à valeurs complexes,  $\psi(M, t)$ , la **fonction d'onde**.

La lumière et la matière présentent un comportement ondulatoire ou particulaire. Il n'existe pas de description classique cohérente, en termes d'onde ou de particule, permettant d'interpréter les différents phénomènes observés ; c'est le principe de complémentarité de Bohr. La physique quantique a été élaborée de façon à donner une description unique et précise de tous les phénomènes observés, qu'il s'agisse de la lumière ou de la matière. La probabilité de détecter



un photon ou une particule matérielle en un point donné suit une loi qui est déterminée par l'onde elle-même.

L'objectif de ce chapitre est de présenter la théorie ondulatoire de la matière, qui permet de déterminer la probabilité de présence d'une particule matérielle au voisinage d'un point de l'espace à un instant donné.

Dans la suite du cours, nous appellerons particule quantique, ou parfois particule lorsqu'il n'y aura pas d'ambiguïté, les objets physiques étudiés qui pourront révéler un comportement quantique. Par opposition, les particules qui suivent les lois de la mécanique classique, seront nommées particules classiques.

## 1. Fonction d'onde d'une particule sans spin et densité de probabilité de présence

Il s'agit d'une particule sans spin (sans degré de liberté interne, c'est-à-dire sans rotation sur elle-même). il peut par exemple s'agir d'un atome vibrant au cœur d'un matériau ou dans une molécule, soumis aux forces des atomes voisins. Il peut aussi s'agir d'un électron libre se déplaçant dans un fil conducteur (en oubliant le spin). On suppose que la particule quantique est isolée de son environnement. Précisément cela signifie que son mouvement n'influence pas le reste de la nature (les particules environnantes). Par contre on accepte que son environnement exerce sur elle une certaine force  $F$  décrite par une fonction énergie potentielle.

### 1.1. Description de l'état d'une particule

La description complète de l'état dynamique d'une particule quantique, de masse  $m$ , à un instant  $t$  dans un référentiel  $\mathcal{R}$ , se fait par l'intermédiaire d'une *fonction d'onde*  $\psi(M,t)$  à valeurs complexes. La probabilité de présence de la particule, à l'instant  $t$ , dans un volume mésoscopique  $d\tau$  centré au point  $M$  est donnée par la relation :

$$dP(M, t) = \psi(M, t)\psi^*(M, t)d\tau = |\psi(M, t)|^2 d\tau.$$

L'état dynamique de la particule désigne la totalité des grandeurs physiques qui caractérisent le mouvement de la particule dans le référentiel  $\mathcal{R}$ : en particulier la position, la quantité de mouvement, le moment cinétique ou encore l'énergie de la particule.

#### Remarque

Conformément au programme, on se limitera à des problèmes unidimensionnels où la fonction d'onde ne dépendra que d'une seule variable spatiale, par exemple  $x$ . La **probabilité de présence** de la particule, à l'instant  $t$ , entre les abscisses  $x$  et  $x + dx$  est donnée par :

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

## 1.2. Amplitude de probabilité et condition de normalisation

La fonction d'onde  $\psi(x, t)$  est aussi appelée **amplitude de probabilité**. C'est une fonction à valeurs complexes. On appelle *densité de probabilité de présence* la quantité réelle  $|\psi(x, t)|^2$  qu'on note aussi  $\rho(x, t)$  :

$$\rho(x, t) = \frac{dP(x)}{dx} = |\psi(x, t)|^2.$$

La densité de probabilité de présence est une quantité accessible à la mesure, comme on le verra dans le paragraphe suivant, et possède donc une réalité physique.

La fonction d'onde  $\psi(x, t)$  est définie à un facteur de phase près : on admettra que les fonctions d'onde  $\psi_1(x, t)$  et  $\psi_1(x, t)\exp(i\varphi)$ , où  $\varphi$  est une constante, représentent le même état physique d'une particule quantique.

Notons  $D$  le domaine de l'espace accessible à la particule. Celle-ci se trouve *certainement* dans le domaine  $D$ . Cela se traduit mathématiquement par la **relation de normalisation** suivante :

$$\int_D |\psi(x, t)|^2 dx = 1.$$

La fonction d'onde est dite de carré sommable.

## 1.3. Interprétation probabiliste

La probabilité de présence  $dP(M, t)$  représente la probabilité que la particule quantique puisse être détectée au voisinage du point  $M$  par une mesure réalisée à l'instant  $t$ .

La position d'une particule quantique n'est pas certaine : la particule est, *a priori*, *délocalisée* dans tout l'espace accessible. Il en résulte que parler de la valeur instantanée de la position de la particule n'a pas de sens. On peut seulement déterminer la probabilité qu'une mesure de cette grandeur, à un instant fixé, donne telle ou telle valeur. Il en est de même pour la quantité de mouvement de la particule.

Contrairement à la mécanique newtonienne, la définition de l'état dynamique d'une particule, à un instant donné, requiert, en mécanique quantique, la connaissance d'une infinité de variables, à savoir la valeur de la fonction d'onde en chaque point de l'espace à l'instant  $t$ .

## 2. Equation de Schrödinger à une dimension dans un potentiel $V(x)$

### 2.1. Énoncé

L'équation décrivant l'évolution dans l'espace et dans le temps de la fonction d'onde d'une particule quantique de masse  $m$  ayant une énergie potentielle  $V(M,t)$  (désigné parfois potentiel par abus de langage) dans un référentiel  $\mathcal{R}$ , a été postulée par Erwin Schrödinger. Elle s'écrit comme suit :

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

Cette équation est un postulat fondamental de la mécanique quantique. Elle ne se démontre pas mais est parfaitement en accord avec les résultats expérimentaux. C'est ce qui lui confère sa légitimité.

Conformément au programme, nous nous limiterons à l'étude de problèmes unidimensionnels (en choisissant de travailler avec la coordonnée d'espace  $x$ ) où l'énergie potentielle de la particule quantique est indépendante du temps. L'équation de Schrödinger prend alors la forme suivante :

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

#### Remarques

- L'équation de Schrödinger fait intervenir la constante de Planck réduite :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \times 10^{-34} \text{ J.s.}$$

- Cette équation est du premier ordre par rapport à la variable temporelle. Ainsi, si la fonction d'onde est complètement connue à un instant initial  $t_0$ , elle le sera à tout instant ultérieur. L'état de la particule quantique pourra alors être complètement déterminé à tout instant à partir d'un état initial connu.
- Cette équation joue en physique quantique le même rôle que la deuxième loi de Newton. Elle est même plus fondamentale puisque, comme on le verra ultérieurement, la théorie quantique englobe la théorie classique. Tout comme en mécanique classique, cette équation traduit ainsi une loi de conservation d'énergie.
- Comme en mécanique classique, l'énergie potentielle peut être définie à une constante additive près.

## 2.2. Principe de superposition

Comme l'équation de Schrödinger est *linéaire*, on peut superposer des solutions pour construire d'autres solutions. Ainsi, si  $\psi_1(x, t)$  et  $\psi_2(x, t)$  sont deux solutions, alors  $\alpha_1\psi_1(x, t) + \alpha_2\psi_2(x, t)$ , où  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  sont deux constantes complexes, est aussi une solution acceptable pourvu qu'elle soit correctement normalisée.

## 3. Etats stationnaires de l'équation de Schrödinger

### 3.1. Définition d'un état stationnaire

On appelle **état stationnaire** un état du système caractérisé par une fonction d'onde *factorisée* sous la forme  $\psi(x, t) = \varphi(x)f(t)$ , où  $\varphi$  et  $f$  sont *a priori* deux fonctions à valeur complexes.

Le mot stationnaire a un sens différent en mécanique quantique et en physique ondulatoire classique. L'onde associée à un état stationnaire en mécanique quantique se distingue de l'onde stationnaire de la physique des ondes, où une onde stationnaire correspond à une forme factorisée sous la forme d'un produit d'une fonction réelle de l'espace et d'une fonction réelle du temps.

### 3.2. Recherche d'une solution par séparation des variables

L'énergie potentielle  $V(x)$  étant, par hypothèse, indépendante du temps, on recherche des solutions de l'équation de Schrödinger en écrivant la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  sous la forme d'un produit d'une fonction  $\varphi(x)$  ne dépendant que de  $x$  et d'une fonction  $f(t)$  ne dépendant que du temps :

$$\psi(x, t) = \varphi(x)f(t).$$

- **Propriétés d'une solution à variables séparées** : La condition de normalisation de la fonction d'onde (on suppose que  $x \in \mathcal{D}$ ) permet d'écrire :  $\int_{\mathcal{D}} |\psi(x, t)|^2 dx = |f(t)|^2 \int_{\mathcal{D}} |\varphi(x)|^2 dx = 1$ . Cela implique que  $|f(t)|$  est une constante indépendante du temps. Comme  $\psi(x, t) = \varphi(x)f(t)$ , on peut tout à fait choisir  $|f(t)| = 1$  et faire rentrer la constante dans  $\varphi(x)$ . Cela impose à la fonction  $\varphi(x)$  d'être normalisée comme suit :  $\int_{\mathcal{D}} |\varphi(x)|^2 dx = 1$ . On peut donc écrire la fonction d'onde sous la forme suivante :

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \exp(i\alpha(t)),$$

où  $\alpha(t)$  est une fonction du temps, indéterminée pour le moment. La fonction d'onde factorisée  $\psi(x, t)$  est celle d'un état stationnaire. Il lui correspond une densité de probabilité de présence  $|\psi(x, t)|^2 = |\varphi(x)|^2$  indépendante du temps.

Nous retiendrons ce résultat important :

**La densité de probabilité de présence  $|\psi(x, t)|^2$  associée à un état stationnaire est indépendante du temps.**

➤ **Équation de Schrödinger indépendante du temps :**

on injecte l'expression factorisée de la fonction d'onde dans l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial(\varphi(x)\exp(i\alpha(t)))}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2(\varphi(x)\exp(i\alpha(t)))}{\partial x^2} + V(x)(\varphi(x)\exp(i\alpha(t))),$$

$$\text{soit encore : } -\hbar\dot{\alpha}(t)\exp(i\alpha(t)) = -\frac{\hbar^2}{2m}\exp(i\alpha(t))\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x)\exp(i\alpha(t))$$

En factorisant par le produit  $\varphi(x)\exp(i\alpha(t))$  (pour une valeur de  $x$  telle que  $\varphi(x) \neq 0$ ), on obtient :

$$\varphi(x)\exp(i\alpha(t))\left(-\hbar\dot{\alpha}(t) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} - V(x)\right) = 0.$$

Comme la fonction d'onde  $\psi(x, t) = \varphi(x)\exp(i\alpha(t))$  n'est pas identiquement nulle, on déduit de la relation précédente, une équation où les variables  $x$  et  $t$  sont complètement séparées :

$$-\hbar\dot{\alpha}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} + V(x).$$

Le membre de droite de cette équation étant indépendant du temps, il en résulte que  $\dot{\alpha}$  est une constante indépendante du temps, homogène à une pulsation. Posons  $\dot{\alpha} = -\omega$  (le choix du signe sera justifié ultérieurement). Le produit  $\hbar\omega$  est homogène à une énergie. Aussi, on pose  $\boxed{E = \hbar\omega = \hbar\nu}$ .  $E$  représente l'énergie totale de la particule quantique.

L'équation ci-dessus prend alors la forme suivante, connue sous le nom d'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)}$$

et la fonction d'onde de l'état stationnaire est donc de la forme :

$$\boxed{\psi(x, t) = \varphi(x)\exp(-i\omega t)} \Rightarrow \boxed{\psi(x, t) = \varphi(x)\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)}$$

**Remarque**

L'équation de Schrödinger indépendante du temps est appelée **équation aux valeurs propres**. En effet, dans le langage de la théorie des équations aux dérivées partielles,

$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$  est un opérateur différentiel qui agit sur la fonction  $\varphi(x)$ . Cet opérateur

est appelé **hamiltonien**. Écrite avec l'opérateur  $\hat{H}$ , l'équation aux valeurs propres devient :

$$[\hat{H}\varphi](x) = E\varphi(x).$$

Cette équation montre que les solutions  $\varphi(x)$  sont les fonctions propres de l'opérateur  $\hat{H}$  associées aux valeurs propres  $E$  (*énergie du système*). Pour cette raison, les solutions de cette équation sont appelées **fonctions d'onde propres**.

### 3.3. Conditions imposées à la fonction d'onde propre

Toute solution  $\varphi(x)$  de l'équation, définie sur un intervalle  $\mathcal{D}$ , doit vérifier les propriétés suivantes :

**Propriété 1** : la fonction  $\varphi(x)$  ne peut prendre qu'une seule valeur à l'abscisse  $x$ .

**Propriété 2** : la fonction  $\varphi(x)$  est normalisée :  $\int_{\mathcal{D}} |\varphi(x)|^2 dx = 1$ . Cette condition interdit à  $\varphi(x)$  de diverger en  $\pm\infty$  (ceci n'étant à prendre en compte que si  $\mathcal{D}$  s'étend jusqu'à l'infini).

**Propriété 3** : la fonction  $\varphi(x)$  est continue.

**Propriété 4** : la fonction dérivée  $\frac{d\varphi(x)}{dx}$  est continue en tout point où l'énergie potentielle  $V(x)$  est continue ou ne présente pas de discontinuité d'amplitude infinie.

Il se trouve que, dans de nombreux cas, les solutions physiquement acceptables qui vérifient toutes ces conditions ne correspondent qu'à certaines valeurs discrètes de l'énergie  $E$ . Pour une particule quantique donnée dans un potentiel donné, toutes les valeurs de l'énergie  $E$  ne sont pas autorisées : c'est là qu'apparaît la *quantification de l'énergie*.

## 4. Physique classique – Physique quantique

### 4.1. Principe de correspondance de Bohr

Le rapprochement des prédictions quantique et classique dans la limite classique correspond au principe de correspondance de Bohr :

Dans les conditions où les résultats classiques et quantiques doivent concorder, la théorie quantique doit se ramener au résultat classique.

### 4.2. Correspondance grandeurs classiques – grandeurs quantiques

En physique quantique, dans le cas unidimensionnel de variable spatiale  $x$ , avec une énergie potentielle indépendante du temps :



$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$  est l'opérateur associé à l'énergie cinétique

$V(x)$  est l'opérateur associé à l'énergie potentielle

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  est l'opérateur associé à l'énergie totale qui est donc équivalent à  $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)$

(D'après l'équation de Schrödinger).

Ci-dessous la correspondance entre la physique classique et la physique quantique.

|                               | Physique classique  | Physique quantique  |
|-------------------------------|---|---|
| Caractéristiques intrinsèques | masse $m$ (ou charge $q$ )                                    | masse $m$ (ou charge $q$ )  |
| Etat de la particule          | Position $x(t)$<br>Impulsion $p(t) = mv(t) = m \frac{dx}{dt}$ | fonction d'onde<br>$\psi(x, t)$   |
| Evolution                     | déterministe<br>$x, p$  | aléatoire<br>$dP =  \psi(x, t) ^2 dx$   |
| Energie cinétique             | $\frac{p^2}{2m}$  | $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$   |
| Energie totale                | $\frac{p^2}{2m} + V(x)$<br>( $V(x)$ : énergie potentielle)    | $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)$<br>( $V(x)$ : énergie potentielle)              |
| Equation du mouvement         | $\frac{dp}{dt} = F$ avec $F = -\frac{dV(x)}{dx}$              | $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi$ |