

Chapitre 2

Approche ondulatoire de la mécanique quantique

Introduction

Nous avons mis en évidence la dualité onde-corpuscule : la quantification en photons des ondes électromagnétique ainsi que le chemin inverse pris par de Broglie pour "ondualiser" la matière. Nous allons présenter ici la notion de fonction d'onde et l'interprétation en ondes de probabilité du caractère ondulatoire de la matière. De Broglie nous a donné la relation de dispersion qui régit ces ondes, nous allons en déduire que les fonctions d'onde obéissent à l'équation de Schrödinger. C'est en effet Schrödinger en 1926 qui a posé les fondements de la mécanique ondulatoire en avançant plusieurs principes, parmi lesquels sa célèbre équation.

2.1 Interférences de matière et interprétation probabiliste

Schrödinger n'avait pas d'expérience prouvant le caractère ondulatoire de la matière à sa disposition lorsqu'il développa son équation, mais seulement l'hypothèse de de Broglie. Les confirmations expérimentales vinrent après. L'interprétation probabiliste elle-même est très tardive. Nous avons déjà présenté l'expérience de diffraction des électrons par un cristal, qui vint un an après les articles fondateurs de Schrödinger.

Une expérience qui est longtemps restée une expérience de pensée est celle des interférences d'ondes de matière par des fentes d'Young. Il faut attendre les années 1980 pour voir de telles expériences apparaître, dont l'interprétation simple et directe valide la vision ondulatoire de la matière.

2.1.1 Fentes d'Young éclairées par une onde plane monochromatique

La figure d'interférences obtenue à l'aide d'un jeu de fentes doubles est bien connue, qu'elle soit obtenue à l'aide d'ondes lumineuses, acoustiques ou à la surface d'un liquide. Une onde plane monochromatique de longueur d'onde λ arrivant sur un jeu de deux fentes S_1 et S_2 (Fig. 2.1) produit sur un écran placé après celles-ci une figure dont l'intensité n'est pas la somme des intensités produites par chacune des fentes, sources secondaires, si elles étaient isolées. Si la source secondaire S_1 produit une onde d'amplitude complexe A_1 et S_2 d'amplitude A_2 , l'intensité en un point donné de l'espace est donnée par la formule

$$I = |A_1 + A_2|^2 .$$

Dans le cas des fentes d'Young, le résultat bien connu est la présence de franges d'interférences.

2.1.2 Fentes d'Young bombardées par des particules de matière

L'hypothèse de de Broglie nous amène naturellement à penser que la même expérience peut être réalisée avec des particules matérielles. Toutefois, nous pouvons mesurer la position de telles particules. Le résultat d'une expérience réalisée avec des atomes de néon, d'abord capturés et refroidis au milliKelvin par un piège optique, puis lâchés sur un écran percé de deux fentes parallèles est présenté Fig. 2.2. Des franges d'interférences y sont visibles, mais les impacts de chaque atome également ! On peut définir un équivalent de l'intensité lumineuse en comptant le nombre d'impacts dans une région de l'écran et alors définir un interfrange. L'interfrange mesuré

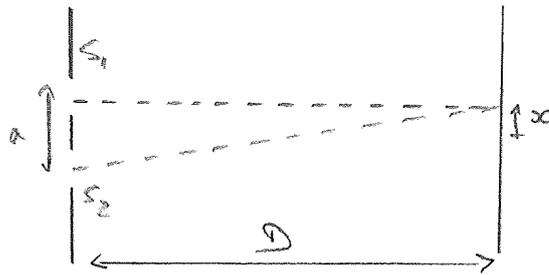


FIGURE 2.1 – Principe du dispositif des fentes d'Young.

est $x_i = \lambda D/a$ où D est la distance fentes/écran, a la distance séparant les deux fentes et λ est donnée par les relations de Planck-Einstein (la vitesse des atomes changeant au cours de l'expérience, il faut prendre cela en compte pour faire le calcul exact de la figure d'interférences, ainsi que la diffraction par chaque fente).

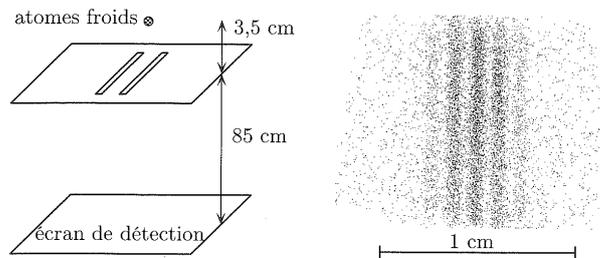


FIGURE 2.2 – Interférences de matière. Images extraites de [Basdevant].

[Panorama de la physique, CD du Basdevant et Dalibard, Le Bellac p.22 et 27, vidéos : toutestquantique.fr].

2.1.3 Interprétation probabiliste

Si l'interprétation du phénomène d'interférence avec typiquement des ondes à la surface de l'eau, est simple conceptuellement, elle est beaucoup plus mystérieuse avec des particules isolées (que ce soient des photons uniques, des atomes, des neutrons, des molécules...). Des ondes à la surface de l'eau sont séparées par les fentes, se recombinent après, et forment la figure d'interférence. Mais si l'on parvient à n'envoyer qu'une particule à la fois, de manière à ce qu'elle ait atteint l'écran avant que la particule suivante soit émise, comment interpréter qu'on obtienne une figure d'interférences ? Si la particule n'a aucun caractère ondulatoire on ne devrait obtenir qu'une image géométrique des fentes. Il est absurde d'imaginer que les interférences proviendraient d'un scission de la particule, dont un bout passerait par une fente et un autre bout par l'autre fente, puisque l'expérience peut être réalisée avec des particules élémentaires (neutrons, photons dans le vide) et qu'on ne détecte pas sur l'écran une particule éclatée mais bien un impact bien défini.

Si l'on doit donc admettre que la particule quantique est insécable, peut-on déterminer par quelle fente elle est passée ? On peut se convaincre que cela n'est pas possible. Imaginons que l'on puisse étiqueter chaque particule arrivée sur l'écran comme "étant passée par S_1 " ou "étant passée par S_2 ". Alors, en n'observant que la figure formée par l'un des groupes de particules, on devrait observer une figure indépendante de l'existence d'une seconde fente, ce qui n'est pas le cas. Autrement dit, dire que l'on peut déterminer par quelle fente est passée une particule est une négation du caractère ondulatoire du "passage" par les deux fentes. Donc, si le dispositif permet de déterminer la trajectoire d'une particule quantique, il interdit les interférences. On voit donc que, si l'on peut mesurer une position d'arrivée, on doit abandonner la notion de trajectoire pour une particule quantique. Il faut se contenter d'une approche probabiliste : la figure d'interférences décrit la probabilité d'arrivée sur l'écran d'une particule mais il est impossible de définir le chemin qu'emprunte une particule donnée.

Il faut bien noter qu'il suffit d'un dispositif ayant la capacité d'étiqueter les deux trajectoires possibles pour détruire les interférences quantiques, même si cet étiquetage se fait sans perturber (c'est à dire de manière négligeable) les trajectoires atomiques [Le Bellac Ch.1 p. 29, Basdevant p. 123]. Les interférences proviennent de l'indiscernabilité des trajectoires.

Nous résumons donc deux conclusions fondamentales.

- Une mesure en mécanique quantique perturbe en général le système : mesurer le passage par une des fentes détruit les interférences.
- Les particules n'ont plus de trajectoires au sens classique : le résultat d'une expérience est décrit par des probabilités et un formalisme ondulatoire.

[Le Bellac Ch. 4 p. 114]

2.2 Fonction d'onde et équation de Schrödinger.

[Chapitres 2 et 3 Basdevant. Chapitre 1 Cohen.]

2.2.1 Construction et évolution de la fonction d'onde

On a dégagé certains aspects du caractère ondulatoire des corpuscules matériels. Cette part ondulatoire est représentée par une *fonction d'onde* dont les caractéristiques sont les suivantes :

1. On ne peut plus parler de trajectoire, l'état d'une particule n'est plus déterminé par un nombre fini de paramètres (\vec{r}, \vec{v}) : l'état quantique d'une particule est caractérisé par une fonction $\psi(\vec{r}, t)$ dépendant du temps qui contient toute l'information sur la particule.
2. $\psi(\vec{r}, t)$ est interprétée comme une *amplitude de probabilité de présence* : la densité de probabilité de présence d'une particule d' P dans un volume $d^3 \vec{r}$ autour de la position \vec{r} est

$$dP = C |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3 \vec{r} ,$$

où C est une constante de normalisation telle que

$$\int dP = 1 .$$

On fait souvent le choix $C = 1$ de manière à avoir

$$\int |\psi|^2 d^3 \vec{r} = 1 .$$

De plus, la fonction d'onde ne peut en aucun cas diverger.

3. Le *principe de décomposition spectrale* s'applique à la mesure d'une grandeur physique quelconque A
 - le résultat trouvé appartient forcément à un ensemble de résultats propres $\{a\}$,
 - à chaque valeur propre a est associé un état propre $\psi_a(\vec{r})$ tel que si à l'instant t_0 de la mesure $\psi(\vec{r}, t_0) = \psi_a(\vec{r})$, la mesure donnera à coup sûr a ,
 - on peut décomposer la fonction d'onde à un instant donné sur les états propres

$$\psi(\vec{r}, t_0) = \sum_a c_a(t_0) \psi_a(\vec{r}) ,$$

ce qui permet de donner la probabilité P_a d'obtenir le résultat a en t_0

$$P_a = \frac{|c_a|^2}{\sum_a |c_a|^2} ,$$

— si la mesure donne a , la fonction d'onde immédiatement après la mesure est $\psi'(\vec{r}, t_0) = \psi_a(\vec{r})$.

4. On postule l'équation d'évolution de la fonction d'onde. Elle rend compte des relations de Planck et de Broglie et sa validité est prouvée expérimentalement. Un particule de masse m subissant l'action d'un potentiel $V(\vec{r}, t)$ voit sa fonction d'onde obéir à **l'équation de Schrödinger** :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) , \quad (2.1)$$

où Δ est le Laplacien $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ (ici en coordonnées cartésiennes).

La linéarité de l'équation de Schrödinger mène au principe de superposition quantique : deux états ψ_a et ψ_b peuvent se superposer $\psi = c_a \psi_a + c_b \psi_b$, ce qui est à la base de l'interprétation ondulatoire de l'expérience des fentes d'Young.

Ayant abandonné la notion de trajectoire, on peut seulement définir une position moyenne $\langle \vec{r} \rangle = \int \vec{r} |\psi|^2 d^3 \vec{r}$. Le caractère quantique ou non de cette position est suggéré par les fluctuations autour de $\langle \vec{r} \rangle$, typiquement à 1D : $\Delta x^2 = \int x^2 |\psi(x)|^2 dx - (\int x |\psi(x)|^2 dx)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$.

Remarque importante : on développe ici une théorie décrivant des particules matérielles non relativistes. Le photon étant de masse nulle et, qui plus est, relativiste par excellence, il ne peut être décrit par l'équation de Schrödinger. Pour décrire la dynamique d'un photon, on a besoin d'une théorie quantique relativiste, telle que la théorie quantique des champs (le photon étant alors soumis à l'équation de d'Alembert, réinterprétée comme l'équation de Klein-Gordon dans le cas $m = 0$).

2.2.2 Paquets d'ondes

Paquet d'onde quelconque

Comment décrire une particule à l'aide d'une fonction d'onde ? Pour une particule libre, $V(\vec{r}, t) = 0$, l'équation de Schrödinger se réduit à

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) ,$$

qui sous cette forme admet pour solutions

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} ,$$

avec A une constante et la relation de dispersion

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} .$$

Rq : On voit tout de suite en quoi l'équation de Schrödinger est cohérente avec l'hypothèse de de Broglie puisqu'en admettant que l'énergie d'une particule libre suit la relation classique

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

on voit que la relation de dispersion ci-dessus est cohérente avec $E = \hbar \omega$ et $\vec{p} = \hbar \vec{k}$.

Une onde plane est une solution formelle de l'équation de Schrödinger correspondant à une impulsion $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ bien donnée, qui résulterait d'une mesure de \vec{p} infiniment précise, et de probabilité de présence uniforme sur tout l'espace

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |A|^2 ,$$

donc de position complètement inconnue. Évidemment, une telle probabilité de présence n'est pas normalisable et ne peut représenter un état physique. Toutefois, le principe de superposition nous autorise à construire un "paquet d'ondes"

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(\vec{k})t)} d^3 \vec{k},$$

$g(\vec{k})$ pouvant être complexe et ψ étant de carré sommable. Toute solution de carré sommable peut être écrite sous cette forme.

Ce formalisme est très pratique puisque, comme on le remarque aisément, $g(\vec{k})$ est la transformée de Fourier de $\psi(\vec{r}, 0)$

$$g(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \psi(\vec{r}, 0) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3 \vec{r}.$$

Relation d'incertitude de Heisenberg : diffraction par une fente

Avant de passer à des considérations plus quantitatives, ramenons-nous au cas d'une fente simple. Nous avons laissé cela sous le tapis pour l'instant dans le cas des fentes doubles mais, bien évidemment, une fente simple entraîne de la diffraction (dont la présence n'aura pas échappé au lecteur attentif en figure 2.2). Considérons une fente de largeur $\Delta x \sim a$ suffisamment petite pour diffracter une onde quantique de matière de longueur d'onde λ . À la sortie de la fente, la position d'une particule quantique est connue avec une précision Δx selon un axe dans le plan de la fente, perpendiculaire à celle-ci. La tache de diffraction a une largeur angulaire $\sim \lambda/\Delta x$, ce qu'on peut interpréter comme une incertitude $\Delta p_x \sim (\lambda/\Delta x)p = h/\Delta x$ sur l'impulsion selon x (Fig. 2.3). Donc on peut dire qu'une "mesure" de la position de la particule avec incertitude Δx , ici réalisée par le passage par la fente, entraîne une incertitude sur l'impulsion Δp_x , avec une relation de l'ordre de $\Delta x \Delta p_x \sim h$. Nous verrons plus précisément par la suite que cette relation est l'inégalité d'Heisenberg

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2} \hbar.$$

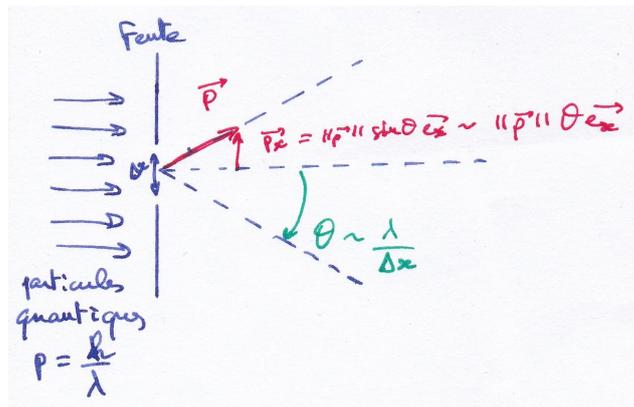


FIGURE 2.3 – Diffraction par une fente et incertitude de Heisenberg.

Relation d'incertitude de Heisenberg : résultat exact 1D

Pour simplifier ramenons-nous au cas 1D :

$$\psi(x, 0) = \int g(k) e^{ikx} dk.$$

On peut interpréter $|g(k)|^2$ comme la probabilité d'observer $p = \hbar k$ lors d'une mesure d'impulsion à $t = 0$, ou plutôt une densité de probabilité d'observer $p \in \hbar[k, k + dk]$ avec

$$d\tilde{P}(\vec{k}) \propto |g(k)|^2 dk.$$

On pourra utiliser p de manière équivalente à k puisqu'ils sont proportionnels

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{g}(p) e^{ipx/\hbar} dp .$$

On peut montrer qu'en considérant les écarts quadratiques moyens Δx et Δp

$$\Delta x^2 = \int x^2 |\psi(x)|^2 dx - \left(\int x |\psi(x)|^2 dx \right)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 ,$$

$$\Delta p^2 = \int p^2 |\tilde{g}(p)|^2 dp - \left(\int p |\tilde{g}(p)|^2 dp \right)^2 ,$$

on obtient la relation d'incertitude de Heisenberg [W. Appel : *Mathématiques pour la physique et les physiciens*]

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2 .$$

Si \hbar était nul, on serait toujours dans le cas classique d'une particule dont la position et l'impulsion sont définies avec une précision infinie. Dans le cas quantique, si la position d'une particule est définie avec une incertitude Δx , il existe une borne inférieure à la précision avec laquelle peut être définie son impulsion. Rq : le \hbar dans la relation d'incertitude vient du fait qu'on utilise x et p . En utilisant x et k on a une transformée de Fourier habituelle et $\Delta x \Delta k \geq 1/2$.

Limite classique

On peut trouver le déplacement du centre du paquet d'onde

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(\vec{k})t)} d^3 \vec{k} ,$$

par la méthode de la "phase stationnaire". Sans entrer dans les détails, la vitesse du maximum du paquet d'onde pour lequel $|g(k)|$ prend des valeurs non négligeables sur un intervalle $[k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2}]$ centré sur k_0 est

$$V_G(k_0) = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} .$$

On l'appelle "vitesse de groupe" et dans le cas d'une particule libre

$$V_G(k_0) = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m} ,$$

correspond à la "vitesse" $v_0 = \frac{p_0}{m}$ associée à k_0 . Donc, dans le cas d'un corpuscule macroscopique pour lequel la précision sur la position et l'impulsion nécessaires à la description du mouvement sont très grandes devant les largeurs Δx et Δp du paquet d'onde nécessaire à sa description quantique, la relation d'incertitude n'introduit aucune contrainte mesurable. On dit souvent qu'à $\hbar \sim 0$, la vitesse de groupe et la position moyenne du paquet d'onde permettent de revenir à une description classique du mouvement. C'est équivalent au passage de l'optique ondulatoire à l'optique géométrique. [Cohen p. 31-32]

2.2.3 Évolution de la fonction d'onde et propagateur pour une particule libre

Soit un paquet d'onde

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(\vec{k})t)} d^3 \vec{k} ,$$

implicitement on a pris $t_0 = 0$. De manière générale on peut écrire

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \tilde{g}(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(\vec{k})(t-t'))} d^3 \vec{k} ,$$

et puisque $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ pour une particule libre

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \tilde{g}(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{\hbar k^2}{2m}(t-t'))} d^3 \vec{k} .$$

On peut montrer en utilisant les propriétés de la TF que la connaissance de $\psi(\vec{r}', t')$ en un instant t' pour toute position \vec{r}' permet de connaître $\psi(\vec{r}, t)$ pour (\vec{r}, t) quelconque :

$$\psi(\vec{r}, t) = \int U(\vec{r}, t; \vec{r}', t') \psi(\vec{r}', t') d^3 r' ,$$

où

$$U(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t-t')} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{im(\vec{r} - \vec{r}')^2}{\hbar 2(t-t')} \right) , \quad (2.2)$$

étant appelée "propagateur" de l'équation de Schrödinger (c'est une fonction de Green) et représentant l'amplitude de transition du point (\vec{r}', t') au point (\vec{r}, t) . On voit que tous les chemins possibles doivent être pris en compte a priori. Le déterminisme de la mécanique ondulatoire est ici apparent : si la fonction d'onde représente une onde de probabilité, son évolution n'est pas aléatoire mais entièrement déterminée par des CI.

[Cohen Complément G_I p.73, Le Bellac p.285, Basdevant p.65-67]

2.2.4 Étalement du paquet d'onde et retour sur les fentes d'Young

On utilise une résolution numérique de l'équation de Schrödinger pour calculer l'évolution d'un paquet d'onde Gaussien. D'abord dans le cas libre à 1D (Fig. 2.4) : le paquet d'onde s'étalement, la connaissance de la position de la particule diminue avec le temps. Cela est également apparent si on considère la forme du propagateur de l'équation de Schrödinger, Eq.2.2, une gaussienne d'écart type $\sigma \propto \sqrt{t-t'}$ augmentant avec le temps.

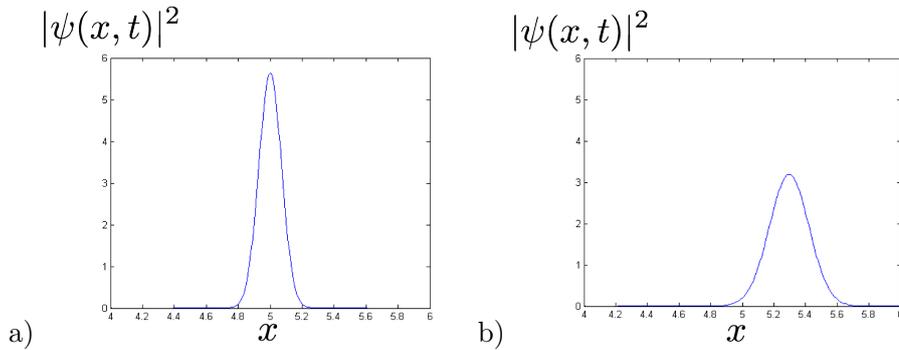


FIGURE 2.4 – Résolution numérique de l'équation de Schrödinger (Runge-Kutta d'ordre 4) : étalement d'un paquet d'onde gaussien. $|\psi(x, t)|^2$ en fonction de x à deux temps différents (unités de simulation pour x et t).

On peut aussi revenir sur le problème des fentes d'Young en faisant une résolution numérique de l'équation de Schrödinger, Fig. 2.5 : on constate clairement les franges d'interférences.

2.2.5 Courant de probabilité.

Une conséquence de l'interprétation probabiliste de la fonction d'onde est qu'il existe une équation de conservation de la norme $|\psi|^2$: si la probabilité de présence en un point de l'espace décroît, elle doit croître autre part (conservation de la matière) et il doit donc exister un courant de probabilité. On veut assurer que (par exemple dans le cas 1D)

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 0 ,$$

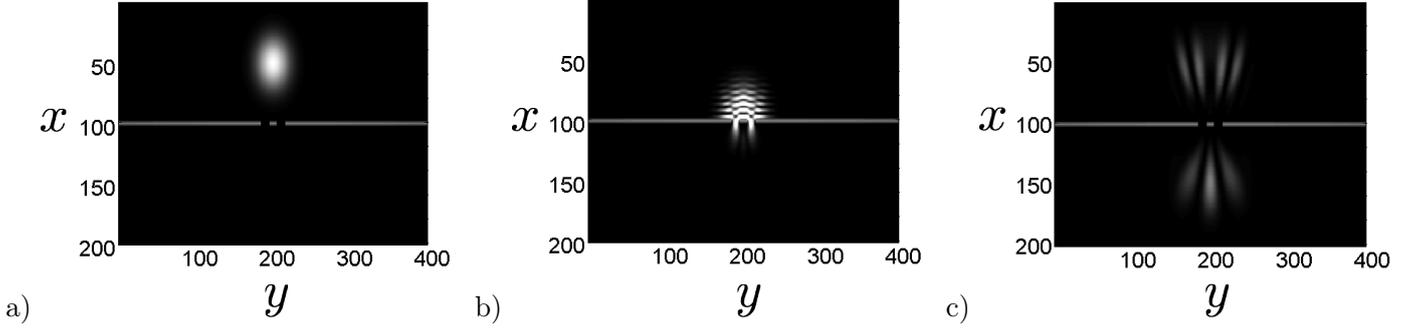


FIGURE 2.5 – Diffraction d'un paquet d'onde Gaussien par des fentes d'Young : résolution numérique (Runge-Kutta d'ordre 4). Les niveaux de gris représentent $|\psi(x, y, t)|^2$. De gauche à droite : même simulation à trois temps différents.

on définit donc une densité de probabilité

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 ,$$

équivalent de la densité de particule ou de la masse volumique dans des problèmes classiques de conservation. On peut intuitiver (mais ça n'est pas une démonstration) la forme du courant j de probabilité. On rappelle que

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

Le complexe conjugué de ψ étant noté ψ^* , on a

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

le potentiel $V(x, t)$ étant une fonction réelle de x et t (cela pour que l'opérateur Hamiltonien soit hermitien, assurant que l'énergie est une grandeur réelle). Donc

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(\psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial t} \psi(x, t) \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(\psi^*(x, t) \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi^*(x, t)}{\partial x^2} \psi(x, t) \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial x} \psi(x, t) \right) , \end{aligned}$$

d'où l'équation locale

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(x, t)|^2 = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial x} \psi(x, t) \right) \right] , \quad (2.3)$$

qui, comparée à la forme classique d'une équation de conservation

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x} ,$$

nous amène à définir le courant

$$j = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial x} \psi(x, t) \right) = \frac{1}{m} \text{Re} \left(\psi^* \left[\frac{\hbar}{i} \nabla \right] \psi \right) . \quad (2.4)$$