

SCHÉMAS MÉCANIQUE QUANTIQUE

Nicolas CHIREUX

SCHÉMAS MÉCANIQUE QUANTIQUE

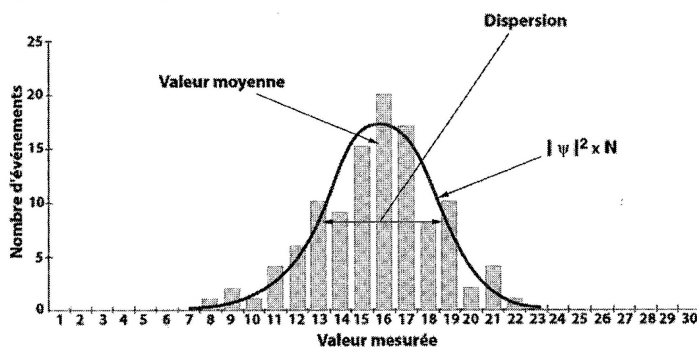
Chapitre 1

Concepts fondamentaux

1.1 Fonction d'onde

1.1.1 Définition

1.1.2 Incertitude statistique et mesure



Exemple simple d'histogramme de la distribution des résultats de mesure de position de particules préparées dans le même état ψ .

Le carré de l'écart quadratique moyen, qui mesure la dispersion des mesures autour de la valeur moyenne, est donné par :

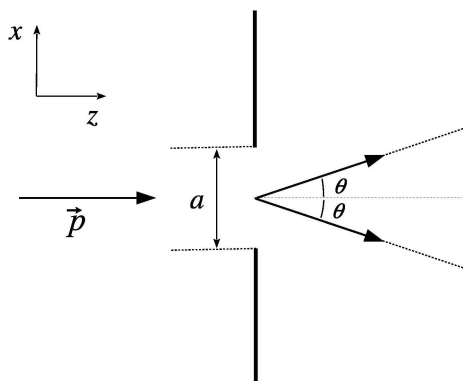
$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad (1.1)$$

On peut définir de même l'incertitude statistique pour p_x la composante suivant \vec{u}_x de la quantité de mouvement :

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2} \quad (1.2)$$

Ces incertitudes n'ont rien à voir avec une quelconque imprécision des mesures. Elles sont intrinsèquement quantiques. Si la précision de mesure δx des appareils de mesure est supérieure à Δx on aura une bonne représentation d'un objet ponctuel.

1.1.3 Relations d'incertitude d'Heisenberg



Revenons à l'expérience de diffraction (de photons, d'électrons ou d'atomes...) par une fente fine de largeur a . Plus la fente est fine, plus la tache de diffraction est large. On note θ la demi-largeur angulaire de la tache centrale de diffraction.

De manière générale, la relation d'incertitude de Heisenberg, s'écrit sous la forme :

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{avec} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (1.3)$$

Cette relation s'applique bien sûr aux deux autres directions de l'espace :

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{et} \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.4)$$

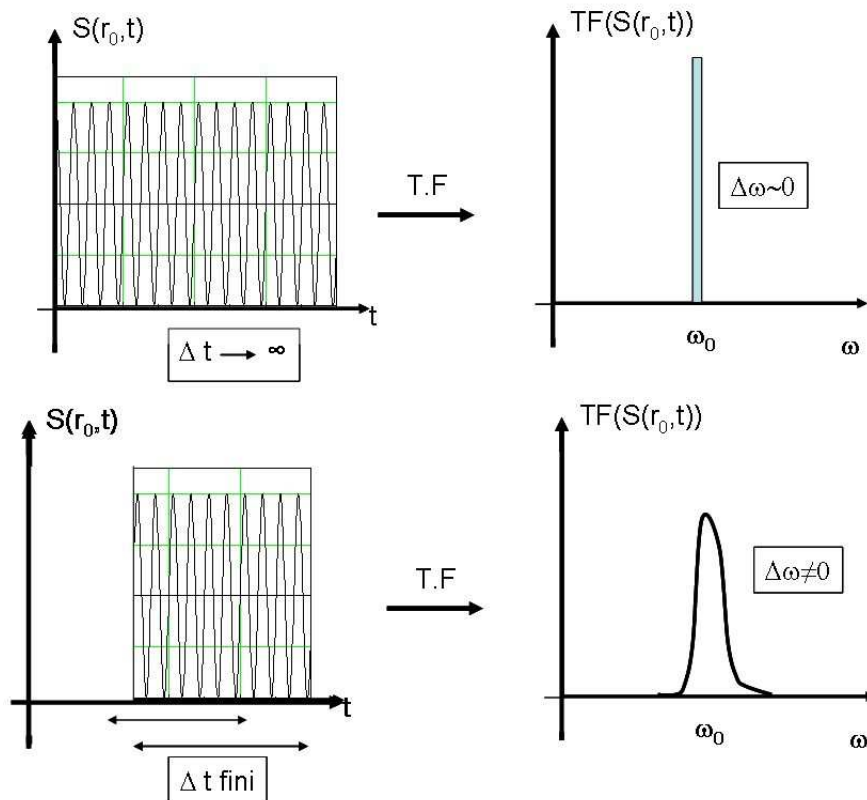
Par contre $\Delta x_i \cdot \Delta p_j$ n'admet pas de limite inférieure non nulle pour $i \neq j$.

On ne peut donc pas mesurer simultanément la position et la quantité de mouvement (donc la vitesse) avec une précision arbitrairement grande. La notion classique de trajectoire, pour laquelle la position et la vitesse sont déterminées à chaque instant disparaît.

Si on confine des particules, leurs vitesses seront très dispersées. Inversement, si on prépare des particules de manière à ce que leur vitesse soit bien déterminée, alors l'indétermination sur leur localisation sera grande (les particules seront délocalisées).

1.1.4 Inégalité de Heisenberg temps - énergie

Les phénomènes ondulatoires concernent tout aussi bien un rayonnement que des corpuscules matériels selon L.de Broglie (dualité onde-corpuscule). Or, une onde représentant un rayonnement et utilisée dans sa version idéale d'onde plane, possède une extension infinie aussi bien spatiale que temporelle. Pour une telle onde, la transformée de Fourier qui donne le spectre en vecteurs d'onde ou pulsation consiste en une distribution de Dirac. Ceci correspond à une absence de dispersion sur la valeur de la pulsation et donc $\Delta\omega \simeq 0$



Si on utilise une onde tronquée dont la durée temporelle Δt est finie, le spectre en pulsation présente une dispersion de largeur finie $\Delta\omega$.

Ainsi, la durée temporelle de l'onde et la dispersion de sa pulsation varient en sens inverse et le traitement mathématique de la transformée de Fourier établit une relation du type :

$$\Delta t \cdot \Delta\omega \simeq 1 \quad (1.5)$$

Si on tient compte de la relation d'un quantum d'énergie $E = h\nu = \hbar\omega$, on en déduit :

$$\Delta t \cdot \Delta E \simeq \hbar \quad (1.6)$$

Cette relation est fondamentale pour le rayonnement car elle exprime qu'un rayonnement purement monochromatique n'existe pas et qu'il existe nécessairement une largeur spectrale finie. Or, le rayonnement étant issu de désexcitation d'atomes, on en déduit que les niveaux d'énergie atomiques sont entachés d'une certaine dispersion.

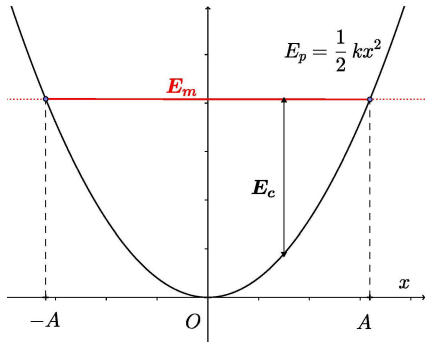
D'après la dualité onde-corpuscule pour des corpuscules matériels, la même analyse effectuée ci-dessus s'applique à des ondes de matières. Dans ce cas, le système (corpuscule matériel) possède une dispersion en énergie inversement proportionnelle à un temps caractéristique de son évolution. Cette situation sera revue lors de la description de l'évolution d'un système par les outils théoriques de la mécanique quantique.

1.1.5 Illustration : énergie minimale d'un oscillateur harmonique quantique

Le modèle de l'oscillateur harmonique a de nombreuses applications :

- en général, le mouvement conservatif d'un point au voisinage d'une position d'équilibre stable est du type harmonique
- au niveau microscopique, les forces d'interaction entre les atomes d'une molécule sont modélisées par des forces élastiques. On peut donc se ramener au modèle de l'oscillateur harmonique pour étudier les vibrations de molécules.

Rappels sur l'oscillateur harmonique classique



Le mouvement harmonique a été étudié en Sup. Si on note x l'écart par rapport à la position d'équilibre, le mouvement harmonique est caractérisé par

$$x(t) = A \cos(\omega_0 t + \varphi) \quad (1.7)$$

$$v(t) = -A\omega_0 \sin(\omega_0 t + \varphi) \quad (1.8)$$

- la position x est comprise entre $-A$ et A
- la vitesse v est comprise entre $-\omega_0 A$ et $\omega_0 A$

L'énergie de l'oscillateur harmonique (correspondant à son énergie mécanique) est donnée par :

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}\omega_0^2 x^2 \quad \text{avec} \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad \text{pulsation propre} \quad (1.9)$$

On a alors que $E = \frac{1}{2}\omega_0^2 A^2$.

Classiquement, la valeur minimale de l'énergie est $E_{min} = 0$.

Oscillateur harmonique quantique

En résolvant l'équation de Schrödinger -que nous allons voir au paragraphe suivant- on trouverait que les niveaux d'énergie de l'oscillateur sont quantifiés. Les valeurs des énergies des différents niveaux s'expriment sous la forme :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_0 \quad \text{avec} \quad n \in \mathbb{N} \quad (1.10)$$

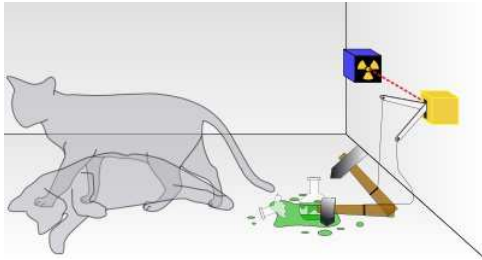
On constate que le niveau d'énergie minimale (pour $n = 0$) vaut bien $E_{min} = \frac{\hbar\omega_0}{2}$

1.2 Équation de Schrödinger unidimensionnelle

1.2.1 Cas d'une particule libre

1.2.2 Linéarité de l'équation de Schrödinger

C'est cette notion de superposition d'états qui est à l'origine du paradoxe du chat de Schrödinger. Un chat est enfermé dans une boîte avec un flacon de gaz mortel et une source radioactive. Si un compteur Geiger détecte un certain seuil de radiations, le flacon est brisé et le chat meurt. Selon l'interprétation de Copenhague, le chat est à la fois vivant et mort. Pourtant, si nous ouvrons la boîte, nous pourrions observer que le chat est soit mort, soit vivant.



Le chat de Schrödinger est une expérience de pensée imaginée en 1935 par le physicien Erwin Schrödinger, afin de mettre en évidence des lacunes supposées de l'interprétation de Copenhague de la physique quantique, et particulièrement mettre en évidence le problème de la mesure.

Au début, on pensait que la mesure en perturbant le système le faisait bifurquer d'un état quantique superposé vers un état mesuré.

Un certain nombre de théoriciens quantiques affirment que l'état de superposition ne peut être maintenu qu'en l'absence d'interactions avec l'environnement qui « déclenche » le choix entre les deux états (mort ou vivant). C'est la théorie de la **dé-cohérence**. La rupture n'est pas provoquée par une action « consciente », que nous interprétons comme une « mesure », mais par des interactions physiques avec l'environnement, de sorte que la cohérence est rompue d'autant plus vite qu'il y a plus d'interactions.



À l'échelle macroscopique, celui des milliards de milliards de particules, la rupture se produit donc pratiquement instantanément. Autrement dit, l'état de superposition ne peut être maintenu que pour des objets de très petite taille (quelques particules). La dé-cohérence se produit indépendamment de la présence d'un observateur, ou même d'une mesure.

1.3 Équation de Schrödinger indépendante du temps

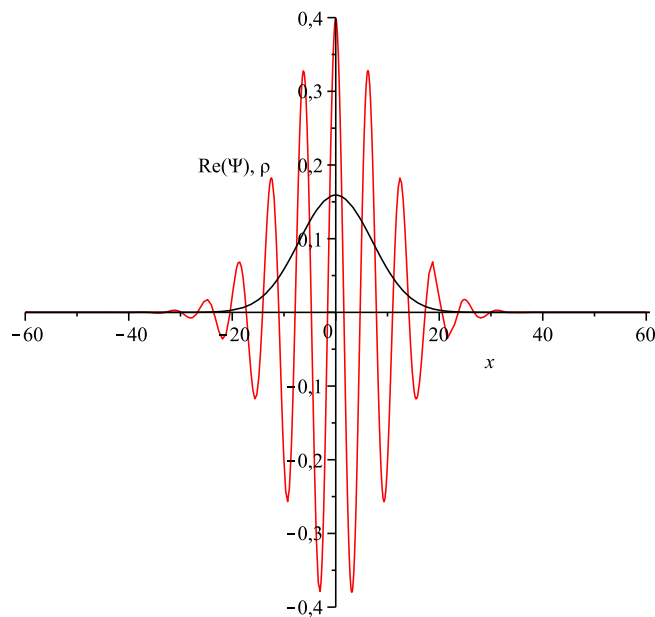
1.3.1 Recherche des fonctions d'onde stationnaires

1.3.2 État quelconque

1.4 Particule libre

1.4.1 Caractère non physique des ondes de De Broglie

1.4.2 Paquet d'onde - Dispersion



En fait seule la superposition d'ondes de de Broglie a un sens : nous considèrerons le paquet d'onde suivant

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (1.11)$$

FIGURE 1.1 – Allure de la fonction d'onde $\Psi(x, t)$ et de la densité ρ associée

Chaque composante se déplace à une vitesse différente puisque $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$: il y aura donc dispersion qui se traduit par un étalement du paquet d'onde.

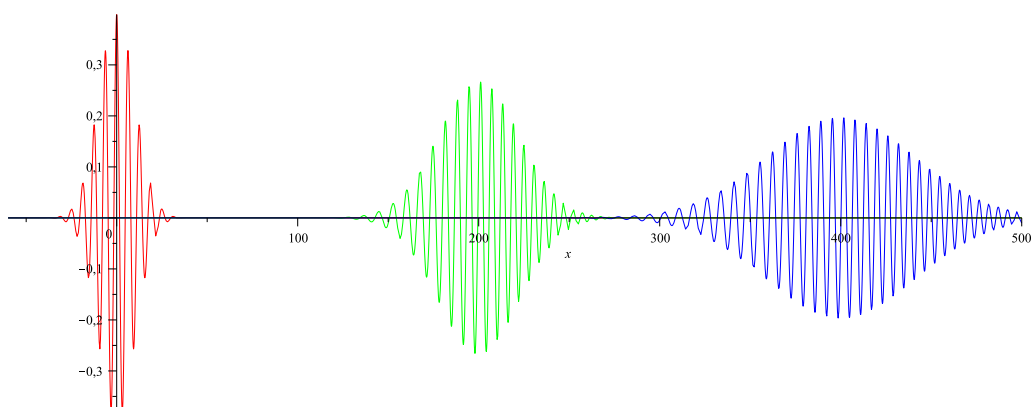


FIGURE 1.2 – Étalement du paquet d'onde associé à de la fonction d'onde $\Psi(x, t)$ à cause de la dispersion

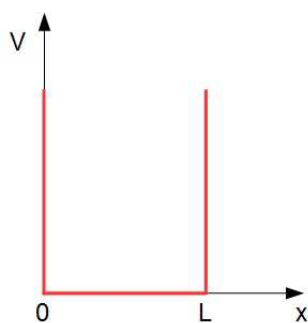
1.4.3 Courant de probabilité

Chapitre 2

États stationnaires d'une particule dans les potentiels constants par morceaux

2.1 Dans un puits infini unidimensionnel

2.1.1 Résolution de l'équation de Schrödinger



Nous devons résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.1)$$

Sachant que $V(x) = 0$ pour $x \in [0, L]$ et que $V(x) = +\infty$ ailleurs, nous avons à résoudre

$$\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + E\psi(x) = 0 \quad (2.2)$$

FIGURE 2.1 – Puits de potentiel infini unidimensionnel

Cas où $E < 0$

Cas où $E > 0$

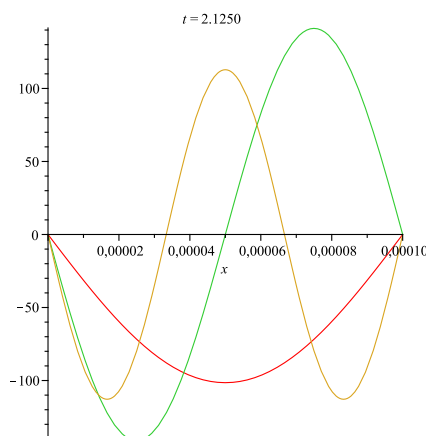


FIGURE 2.2 – Puits de potentiel infini unidimensionnel - Tracé des fonctions d'onde pour $n = 1$, $n = 2$ et $n = 3$

2.1.2 Évolution temporelle d'une particule confinée

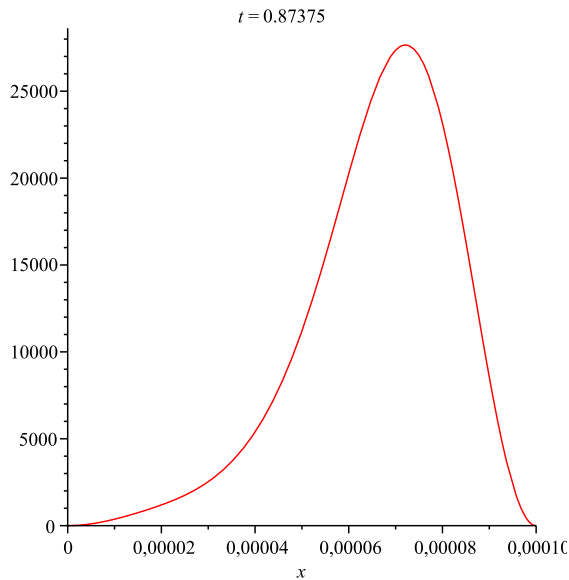
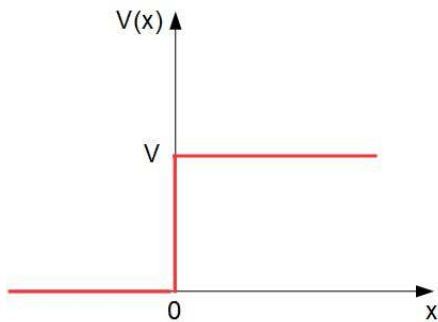


FIGURE 2.3 – Probabilité de présence $\rho = |\Psi(x, t)|^2$ pour $\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{1.29}}(\psi_1 + 0.5\psi_2 + 0.2\psi_3)$

2.2 Dans une marche de potentiel



Une marche de potentiel est une discontinuité finie V de l'énergie potentielle à laquelle est soumise une particule. En mécanique classique il n'y a que deux situations possibles :

- soit l'énergie E de la particule est supérieure à V et la particule peut franchir la marche.
- soit l'énergie E de la particule est inférieure à V et la particule est réfléchiée par la marche.

2.2.1 Cas $E > V$ - Coefficients de réflexion et de transmission

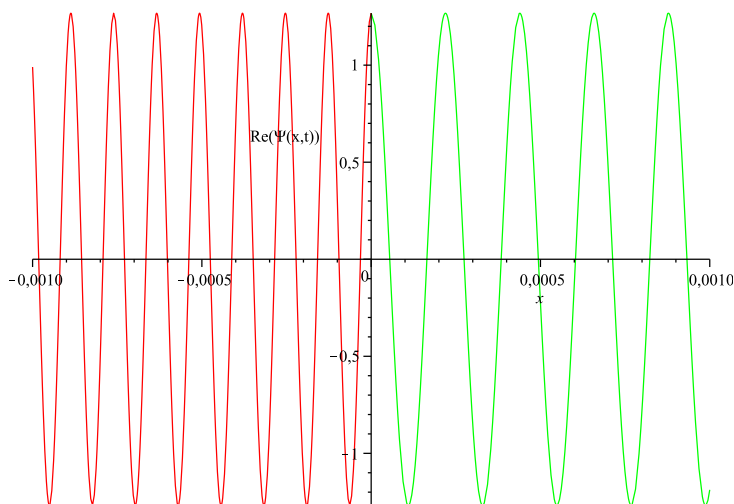


FIGURE 2.4 – Allure de $Re(\Psi(x, t))$ pour $E > V$

Coefficients de réflexion et de transmission

2.2.2 Cas $E < V$ - Évanescence

Coefficients de réflexion et de transmission

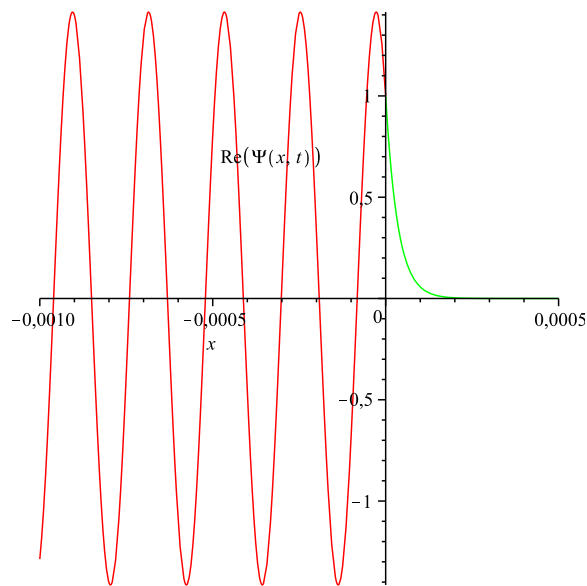
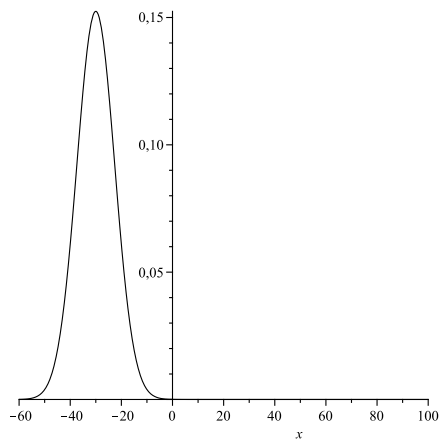


FIGURE 2.5 – Allure de $Re(\Psi(x, t))$ pour $E < V$

2.2.3 Onde gaussienne sur une marche de potentiel

Cas où $E > V$

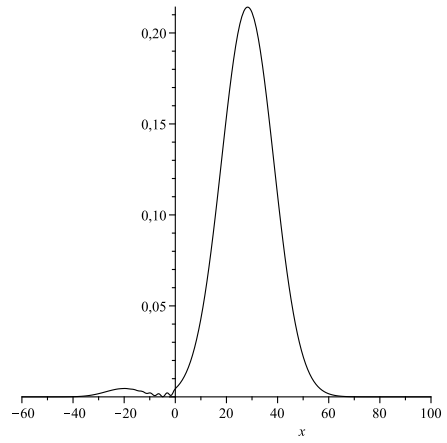
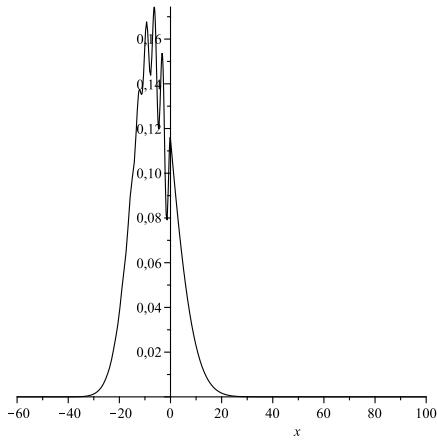


Étudions l'arrivée d'une onde de profil gaussien sur une marche de potentiel. Cette onde résulte de la superposition d'un certain nombre d'onde de De Broglie étudiées précédemment.

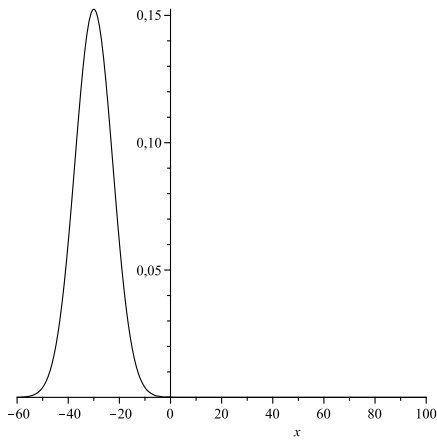
La marche est située en $x = 0$ et nous nous plaçons dans le cas où $E > V$.

Notez les interférences de l'onde réfléchie avec l'onde incidente sur la deuxième figure.

FIGURE 2.6 – Allure de $|\Psi(x, t)|^2$ pour $E > V$

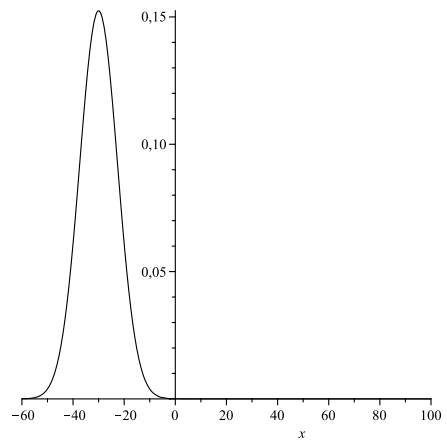
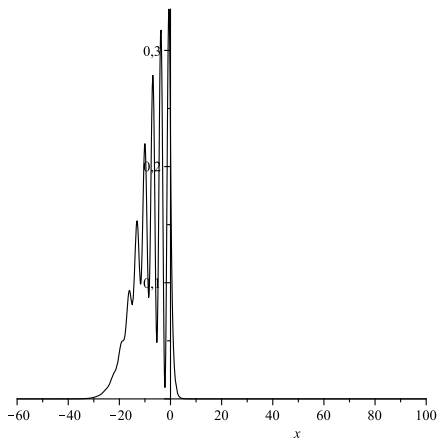


Cas où $E < V$

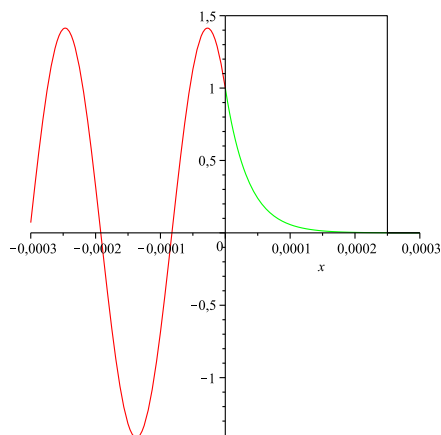


La marche est située en $x = 0$ et nous nous plaçons dans le cas où $E < V$. Notez les interférences de l'onde réfléchie avec l'onde incidente sur la deuxième figure.

FIGURE 2.7 – Allure de $|\Psi(x, t)|^2$ pour $E < V$



2.3 Barrière de potentiel - Effet tunnel



Imaginons maintenant que la marche de potentiel ne soit plus infinie mais d'une longueur a .

Il est aisé de voir que si a devient assez faible, la fonction de l'onde évanescente qui décroît en exponentielle n'aura pas eu le temps de s'annuler. Par continuité de la fonction d'onde en $x = a$, il semblerait une onde transmise puisse alors prendre naissance de l'autre côté de la barrière de potentiel alors que $E < V$: c'est **l'effet tunnel**.

FIGURE 2.8 – Allure de $Re(\Psi(x, t))$ pour $E < V$

