

Licence de Physique Appliquée

Année 2004-2005

## **Introduction à la Physique Quantique**

**Fascicule II : La Mécanique Ondulatoire**

Philippe Tourenc, Paulo Angelo, Jérôme Gariel

Université Pierre et Marie Curie



Bruxelles : 24-29 octobre 1927 (congrès Solvay).





# Table des matières

|  |           |
|--|-----------|
| <b>Introduction</b>  | <b>ix</b> |
| <b>I Le cadre théorique</b>                                  | <b>1</b>  |
| <b>1 L'espace des états</b>                                  | <b>3</b>  |
| 1.1 Introduction.  | 3         |
| 1.2 Propriétés mathématiques des fonctions d'onde.           | 3         |
| 1.3 Interprétation probabiliste de la fonction d'onde.       | 4         |
| 1.4 Densité de présence et de courant                        | 6         |
| 1.5 L'espace de Hilbert des états physiques                  | 9         |
| 1.6 Un modèle de référence à une dimension : le puits infini | 10        |
| 1.7 Bases continues à une dimension.                         | 12        |
| 1.8 Les unités   | 14        |
| Annexe : décomposition d'un paquet d'ondes                   | 15        |
| <b>2 Les observables</b>                                     | <b>19</b> |
| 2.1 Préalables   | 19        |
| 2.2 Opérateurs observables                                   | 21        |
| 2.2.1 Définitions et propriétés mathématiques                | 21        |
| 2.2.2 Le principe de correspondance                          | 23        |
| 2.3 Les mesures en mécanique quantique.                      | 24        |
| 2.3.1 La théorie de la mesure dans le cas discret            | 24        |
| 2.3.2 L'expérience de Stern et Gerlach                       | 26        |
| 2.3.3 La théorie de la mesure dans le cas continu            | 28        |
| 2.3.4 Valeurs moyenne, écart quadratique moyen               | 29        |
| 2.4 Les relations d'indétermination.                         | 30        |
| 2.5 Conclusion   | 33        |
| Annexes  | 33        |
| Démonstrations   | 33        |
| Exemple de mesure  | 35        |
| <b>3 Evolution temporelle d'un état.</b>                     | <b>37</b> |
| 3.1 Introduction   | 37        |
| 3.2 Evolution d'un état.                                     | 38        |
| 3.2.1 Equation d'évolution, hamiltonien                      | 38        |
| 3.2.2 Solution de l'équation d'évolution                     | 39        |
| 3.2.3 Mesure de l'énergie, grandeur conservative             | 40        |
| 3.3 Evolution des valeurs moyennes de grandeurs observables  | 40        |
| 3.3.1 Préalables   | 40        |

|           |   |           |
|-----------|---|-----------|
| 3.3.2     | Evolution d'une valeur moyenne, théorème d'Ehrenfest . . . . .                          | 41        |
| 3.3.3     | Limite classique de la théorie quantique . . . . .                                      | 42        |
| 3.4       | La densité de courant . . . . .   | 43        |
| Annexes   | . . . . .   | 44        |
|           | Grandeur conservative . . . . .   | 44        |
|           | Un exemple d'évolution . . . . .  | 45        |
| <b>II</b> | <b>Modèles à une dimension.</b>   | <b>49</b> |
|           | <b>Rappels</b>  | <b>51</b> |
| <b>4</b>  | <b>La particule libre et la marche de potentiel.</b>                                    | <b>53</b> |
| 4.1       | La particule libre . . . . .  | 53        |
| 4.1.1     | Solution de l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien . . . . .                   | 53        |
| 4.1.2     | Interprétation des états propres de l'énergie . . . . .                                 | 54        |
| 4.1.3     | Interférences . . . . .   | 55        |
| 4.1.4     | Evolution d'un paquet d'onde . . . . .  | 56        |
| 4.2       | La marche de potentiel . . . . .  | 57        |
| 4.2.1     | Le cas $E > V_0$ . :/swp50/temp/graphics/B4thumbbis <sub>2,3</sub> .pdf . . . . .       | 58        |
| 4.2.2     | Le cas $0 < E < V_0$ . :/swp50/temp/graphics/B4pouce <sub>2,7</sub> .pdf . . . . .      | 62        |
| 4.2.3     | Conclusion . . . . .  | 64        |
| <b>5</b>  | <b>La barrière et le puits de potentiel.</b>  | <b>67</b> |
| 5.1       | La barrière de potentiel . . . . .  | 67        |
| 5.1.1     | Le cas $E > V_0$ . :/swp50/temp/graphics/B5thumb <sub>3,1</sub> .pdf . . . . .          | 67        |
| 5.1.2     | Le cas $0 < E < V_0$ . :/swp50/temp/graphics/B5pouce <sub>2,3,4</sub> .pdf . . . . .    | 70        |
| 5.1.3     | Conclusion . . . . .  | 73        |
| 5.2       | Le puits de potentiel . . . . .   | 73        |
| 5.2.1     | Le cas $E > 0$ . :/swp50/temp/graphics/B5figthumb <sub>3,9</sub> .pdf . . . . .         | 73        |
| 5.2.2     | Le cas $V_0 < E < 0$ . :/swp50/temp/graphics/B5thumb <sub>4,1</sub> .pdf . . . . .      | 74        |
| 5.2.3     | L'opérateur parité. . . . .   | 75        |
| 5.2.4     | Etats propres de l'énergie dans cas $V_0 < E < 0$ : <u>fonctions paires</u> . . . . .   | 76        |
| 5.2.5     | Etats propres de l'énergie dans cas $V_0 < E < 0$ : <u>fonctions impaires</u> . . . . . | 77        |
| 5.2.6     | Conclusion . . . . .  | 78        |
| 5.3       | Conclusion en forme de synthèse . . . . .   | 79        |
| <b>6</b>  | <b>Le potentiel périodique</b>  | <b>81</b> |
| 6.1       | Le double puits de potentiel . . . . .  | 81        |
| 6.2       | Le potentiel périodique . . . . .   | 86        |
| 6.3       | Le modèle des électrons libres . . . . .  | 89        |
| 6.4       | Conducteurs et isolants . . . . .   | 90        |
| <b>7</b>  | <b>L'oscillateur harmonique</b>   | <b>93</b> |
| 7.1       | Introduction . . . . .  | 93        |
| 7.2       | Les opérateurs $a$ et $a^+$ . . . . .   | 94        |
| 7.3       | Le spectre de l'hamiltonien . . . . .   | 94        |
| 7.3.1     | Minorant des énergies . . . . .   | 95        |
| 7.3.2     | Echelle des états propres de $H$ "en dessous" de $u_E$ . . . . .                        | 95        |
| 7.3.3     | Le premier barreau ; le spectre de l'hamiltonien . . . . .                              | 96        |
| 7.3.4     | Remonter l'échelle . . . . .  | 97        |
| 7.3.5     | Echelle des états propres de $H$ "au dessus" de $u_E$ . . . . .                         | 97        |

|        |   |     |
|--------|---|-----|
| 7.3.6  | Création et annihilation d'un quantum d'énergie . . . . . | 97  |
| 7.4    | Base standard : relations de récurrence . . . . .         | 98  |
| 7.5    | Paquets d'ondes de l'oscillateur . . . . .                | 100 |
| 7.5.1  | Evolution : cas général . . . . .                         | 100 |
| 7.5.2  | Etats cohérents . . . . .                                 | 101 |
| 7.5.3  | Etats comprimés . . . . .                                 | 103 |
| 7.6    | Champs quantiques . . . . .                               | 105 |
| 7.7    | Conclusion . . . . .                                      | 105 |
| Annexe | . . . . .   | 106 |





# Introduction

## Conventions et notations

Les notations et les conventions utilisées ici sont celles du cours de *Physique Nucléaire et Atomique* ; elles sont résumées dans l'introduction de ce cours (fascicule I de l'*Introduction à la Physique Quantique*) ; nous en complétons la liste ci-dessous.

Sauf mention contraire, l'espace est rapporté à un repère galiléen, orthonormé, direct,  $(O; \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$  de coordonnées  $x, y, z$ .

- On utilise les notations  $\vec{r} = (x, y, z)$  où  $\vec{x} = (x, y, z)$ .
- L'élément de volume est noté  $d^3x = dx dy dz$ .
- Nous omettons les bornes des intégrales lorsque la variable d'intégration court sur l'ensemble des valeurs accessibles ; par exemple  $\int f(x) dx$  signifie  $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx$  et, si l'espace est repéré en coordonnées sphériques,  $\int_0^\infty r dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi (\ ) \sin \theta d\theta$  sera noté  $\iiint (\ ) \sin \theta r dr d\varphi d\theta$

- Les dérivées partielles sont notées

au premier ordre :  $\partial_x = \frac{\partial}{\partial x}$  et de façon similaire  $\partial_y$  et  $\partial_z$

au second ordre :  $\partial_{xx} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ ,  $\partial_{xy} = \frac{\partial^2}{\partial x \partial y}$ , etc.

- Le gradient est l'opérateur vectoriel  $\vec{\nabla} := (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$ . Cet opérateur transforme une fonction en vecteur<sup>†</sup> ; par exemple, étant donnée la fonction  $f(\vec{r})$ , il vient

$$\vec{\nabla}[f] = \frac{\partial f}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial f}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial f}{\partial z} \vec{k}$$

- La divergence est un opérateur qui transforme un vecteur<sup>‡</sup> en une fonction ; par exemple, étant donné le vecteur  $\vec{A}(\vec{r}) = (A_x(\vec{r}), A_y(\vec{r}), A_z(\vec{r}))$ , il vient :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} := \text{div} [\vec{A}] := \partial_x A_x + \partial_y A_y + \partial_z A_z.$$

- Le laplacien est l'opérateur  $\Delta := \partial_{xx} + \partial_{yy} + \partial_{zz}$ . Cet opérateur est parfois noté  $\vec{\nabla}^2$  ; en effet, le produit scalaire  $\vec{\nabla}^2 = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}$  s'écrit sous la forme  $(\partial_x)^2 + (\partial_y)^2 + (\partial_z)^2$ . Pour calculer  $(\partial_x)^2$ , par exemple, on forme  $(\partial_x)^2 f(\vec{r}) = \partial_x (\partial_x f) = \partial_{xx} f$ . Cette relation étant valide pour tout  $f$ , il vient  $(\partial_x)^2 = \partial_{xx}$  et  $\vec{\nabla}^2 = \partial_{xx} + \partial_{yy} + \partial_{zz} = \Delta$ .

- Etant donnée la fonction  $V(\vec{r})$ , et une fonction arbitraire  $\psi(\vec{r})$ . On transforme  $\psi(\vec{r})$  de la façon suivante :  $\psi(\vec{r}) \rightarrow V(\vec{r}) \times \psi(\vec{r})$ . Cette opération définit l'opérateur  $\hat{V}$

---

<sup>†</sup>La fonction vectorielle  $\vec{r} \mapsto \vec{A}(\vec{r})$  est un "champ de vecteurs" ; cependant, par abus de langage, nous employons souvent l'expression "vecteur" au lieu de "champ de vecteurs".

tel que  $(\hat{V}\psi)_{(\vec{r})} := V(\vec{r}) \times \psi(\vec{r})$ . Cet opérateur sera parfois noté  $V$  où même  $V(\vec{r})$ . Dans le cas où  $V(\vec{r}) \equiv 1$ , on notera  $\hat{V} = 1$ , sans distinguer le nombre 1 et l'opérateur unité qui agit sur les fonctions  $\psi(\vec{r})$  (sans les modifier!).

- Etant donné un nombre complexe  $Z$ , son conjugué sera noté  $\bar{Z}$ .
- Etant donné un opérateur linéaire,  $A$ , agissant dans un espace vectoriel muni d'un produit scalaire, le conjugué hermitique de  $A$  sera noté  $A^\dagger$ .

Par la suite, nous supposerons que les cours de mathématiques concernant les espaces de Hilbert, les séries de Fourier et la distribution de Dirac sont assimilés.

### Introduction au cours de mécanique ondulatoire : le contexte

*N.B. Avant d'entreprendre la lecture de ce cours, il est recommandé de revoir en préalable la troisième partie et la conclusion du fascicule I.*

Louis de Broglie introduisit les ondes de matière dans la thèse qu'il soutint en 1924. C'est un peu plus tard, vers la même époque, que Werner Heisenberg élaborait la mécanique des matrices et Paul Dirac sa propre théorie quantique.

Pour que l'hypothèse de de Broglie devienne une "vraie" théorie, il fallait obtenir une équation d'onde qui serait satisfaite par les ondes de matière. Cette étape fut franchie par Erwin Schrödinger en 1926, dans le cas non relativiste.

Dans la même année 1926, Schrödinger, Lorentz, Born, entre autres, résolurent de multiples problèmes tandis que Dirac poursuivait ses propres travaux qui allaient conduire en 1928 à une équation relativiste, l'*équation de Dirac* qui explique naturellement le spin électronique et introduit la notion d'antimatière.

Les diverses approches de Heisenberg, Dirac et Schrödinger apparurent bientôt comme diverses façons de présenter la même théorie connue maintenant sous le nom de "*mécanique quantique*".

La question de la nature des ondes de matière se posa très tôt, de même que la théorie de la mesure en physique. De fortes controverses agitèrent la communauté scientifique. Au congrès Solvay de 1927, les conceptions de l'*école de Copenhague*<sup>†</sup> s'imposèrent faute d'alternatives sérieuses. C'est cette théorie qui sera reprise ici car jamais elle ne fut mise en défaut par l'expérience, si bien qu'elle est acceptée par la très grande majorité des physiciens.

L'interprétation de Copenhague connut des opposants célèbres comme de Broglie et Einstein pour ne citer qu'eux; c'est, aujourd'hui encore, une source d'insatisfactions que tarissent progressivement les travaux actuels sur la décohérence.

Là ne s'arrête pas le développement des théories quantiques. L'effet photoélectrique et l'effet Compton montrent qu'une onde électromagnétique peut, dans certaines conditions, s'interpréter comme un flux de corpuscules : ce sont les photons. L'introduction des ondes de matière et les expériences de diffraction ou d'interférences électroniques montrent que les corpuscules, les électrons dans ce cas, présentent également un aspect ondulatoire : ce sont les ondes de matière. Les ondes associées à des corpuscules libres de masse  $M$  satisfont l'équation d'onde relativiste de Klein-Gordon (cf. la conclusion du fascicule I).

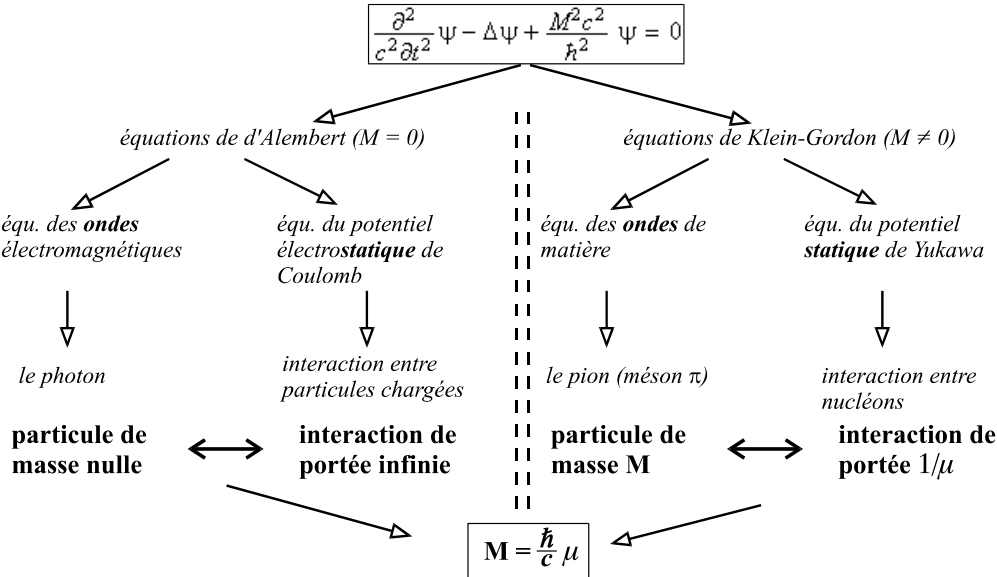
$$\frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} \psi - \Delta \psi + \frac{M^2 c^2}{\hbar^2} \psi = 0$$

<sup>†</sup>Dénomination due à l'implication de Niels Bohr dont les travaux sur la question se poursuivirent encore, après le congrès de 1927.

où  $t$  est le temps et  $\Delta$  le laplacien :  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ , tandis que  $c$  représente la célérité de la lumière dans le vide.

Dans le cas particulier des ondes électromagnétiques les composantes du quadri-potentiel (potentiel  $V$  ou composantes du potentiel vecteur  $\vec{A}$ ) satisfont l'équation de Klein-Gordon avec  $M = 0$ . Une telle équation est appelée équation de d'Alembert. Parmi les composante du quadripotentiel nous considérons le potentiel  $V$ . Dans le cas statique où  $V$  ne dépend pas du temps, il vient  $\frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} V - \Delta V = -\Delta V = 0$ . Dans ce cas, l'équation d'onde devient l'équation du potentiel électrostatique dont la solution à symétrie sphérique est  $V \propto \frac{1}{r}$  où  $r$  est la coordonnée radiale,  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ . L'énergie potentielle de deux charges distantes de  $r$  est alors de la forme  $E(r) \propto \frac{1}{r}$  (pour deux charges élémentaires de signes opposés  $E(r) = -\frac{\alpha \hbar c}{r}$  où  $\alpha$  est la constante de structure fine :  $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$ ).

Ainsi, à l'interaction électrostatique est associée une particule de masse nulle, le photon (voir la figure de gauche, ci dessous).



En suivant un raisonnement analogue dans le cas statique avec  $M \neq 0$ , il vient l'équation  $-\Delta \psi + \frac{M^2 c^2}{\hbar^2} \psi = 0$ . La solution à symétrie sphérique est  $\psi \propto \frac{e^{-\mu r}}{r}$  où  $\frac{2\pi}{\mu} = \frac{h_P}{Mc}$  est la longueur Compton de la masse  $M$ . On interprète  $\Psi$  comme un potentiel. On peut alors admettre, entre certaines particules, l'existence d'une force d'interaction qui dériverait d'une énergie potentielle  $E(r) \propto \frac{e^{-\mu r}}{r}$ . Une telle interaction devient négligeable pour  $r \gg \frac{1}{\mu}$ . La longueur  $\frac{1}{\mu}$  est la "portée" de l'interaction. L'interaction coulombienne est donc une interaction de portée infinie ( $\mu = 0 \Rightarrow \frac{1}{\mu} = \infty$ ).

Dans les noyaux, les nucléons sont liés entre eux par une interaction dont la portée

est de l'ordre de 1,4 fm (cf. l'étude du noyau dans le fascicule I). En 1935 Yukawa émet l'hypothèse hardie qu'à cette interaction est associée une particule de masse  $M$  :

$$M = \frac{\hbar}{c} \mu \simeq 2,5 \cdot 10^{-28} \text{ kg} \simeq 280 m_e \text{ (voir la figure de droite ci-dessus).}$$

La recherche de cette particule conduisit, en 1948, à la découverte du méson  $\pi$  (ou pion).

Les particules peuvent donc se comporter comme des ondes ou des corpuscules selon les conditions opératoires mises en oeuvre, mais en outre, certaines d'entre elles sont aussi des *particules de champ* associées à des interactions spécifiques.

La relativité prévoit (et l'expérience confirme) la possibilité d'annihilation de matière en rayonnement. Il fallut donc construire une théorie quantique qui rende compte de ce mécanisme ainsi que des autres propriétés spécifiquement relativistes. Ce fut la *théorie quantique des champs*. C'est dans ce cadre que se sont développées les théories modernes des interactions fondamentales et qu'ont été enregistrés de notables progrès vers une description unifiée de la physique. Parmi les interactions fondamentales, la gravitation se singularise.

La théorie relativiste de la gravitation est la relativité générale. Celle-ci fut élaborée par Einstein et achevée vers la fin de l'année 1915. Cette théorie n'a pas été mise en défaut jusqu'à présent ; elle reste cependant une théorie classique que l'on tente, aujourd'hui de quantifier et d'intégrer à une vision unifiée de la physique au moyen de la *théorie des cordes*.

Dans le cours qui suit, nous considérons une théorie non relativiste où l'antimatière n'a pas sa place, non plus que les particules de champ ou les mécanismes de création et d'annihilation. Notre but est de présenter le cadre de référence de la mécanique ondulatoire : les conceptions nouvelles qu'elle sous-tend ainsi que les principaux effets qu'elle prévoit et leurs applications, vulgarisées aujourd'hui dans de nombreux domaines de la physique.