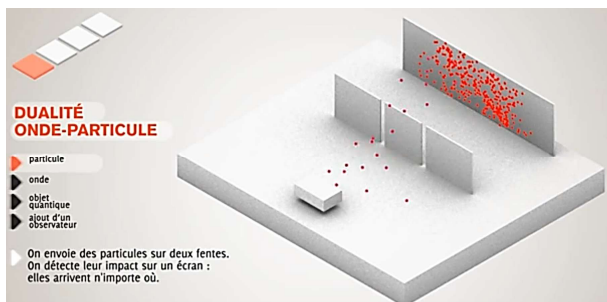


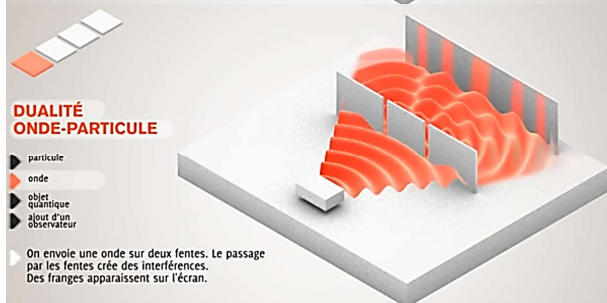
## Dualité onde-corpuscule en physique quantique

Animation (à consulter en ligne)

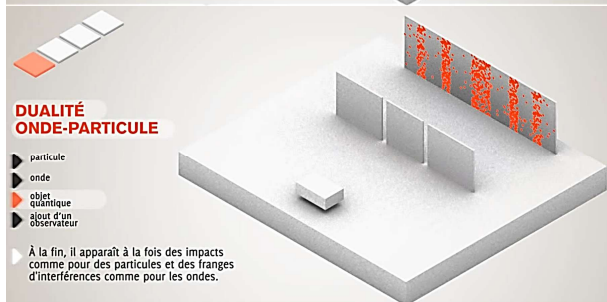
Particule



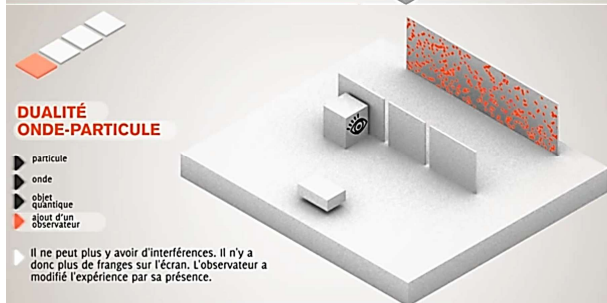
Onde



Objet quantique : onde-particule



Influence de la mesure



## Fonction d'onde – Densité de probabilité de présence

L'expérience précédente prouve qu'a priori chaque particule (électron, atome, molécule) peut frapper le détecteur en *n'importe quel point M* du détecteur mais l'observation d'un grand nombre d'impacts prouve que la *probabilité d'un impact* en ce point *M* *dépend de M*.

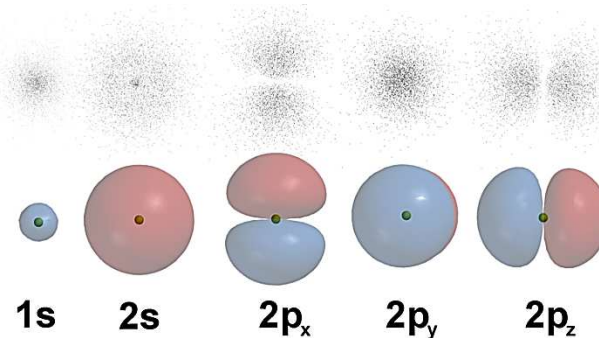
La *figure d'interférence* précédente (type fentes d'Young) peut donc s'interpréter comme l'interférence de deux *fonctions d'onde* décrivant des *probabilités*.

En physique quantique, on associe à toute particule une *fonction d'onde complexe*  $\psi(M, t)$  telle que la probabilité de présence à l'instant  $t$  de la particule dans un élément de volume  $d\tau$  centré au point  $M$  s'écrit :  $dP(M, t) = |\psi(M, t)|^2 d\tau_M$ .

De façon équivalente on définit la *densité de probabilité* (volumique) par :  $\frac{dP}{d\tau} = |\psi(M, t)|^2$ .

La partie réelle de la fonction d'onde n'a pas de signification physique (comme en physique des ondes), la *signification physique de la fonction d'onde est contenue dans le carré de son module égal à la densité de probabilité de présence*.

Cette fonction d'onde est liée à la notion d'orbitale en chimie.



<http://commons.wikimedia.org/wiki/File:AOS-3D-dots.png>

La particule étant nécessairement quelque part dans l'espace, la somme des probabilités doit être égale à 1 ; la fonction d'onde est *normalisée* :  $\sum_{espace} dP = 1$  ou  $\iiint_{espace} |\psi(M, t)|^2 d\tau = 1$ .

Dans la suite, on se restreint à des *situations unidimensionnelles* dans lesquelles la fonction d'onde  $\psi(M, t) = \psi(x, t)$  ne dépend que de la variable spatiale  $x$  et du temps.

On a alors :  $\frac{dP}{dx} = |\psi(x, t)|^2 \Leftrightarrow dP(x, t) = |\psi(x, t)|^2 dx$  et  $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1 \Rightarrow [\psi] = [L]^{-1/2}$ .

## Principe de superposition

L'expérience des fentes d'Young pour laquelle l'intensité (formule de Fresnel) est de la forme

$$I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos\left(\frac{2\pi\delta}{\lambda}\right),$$

peut donc s'interpréter par l'interférence de deux fonctions

d'onde  $\psi_1(M, t)$  (correspondant au cas où la fente (2) est fermée) et  $\psi_2(M, t)$  (fente (1) fermée). La fonction d'onde associée au cas où les deux fentes sont ouvertes est alors (sans souci du préfacteur multiplicatif de normalisation) :

$$\psi(M, t) = \psi_1(M, t) + \psi_2(M, t).$$

**Plus généralement, on postule que si deux états possibles d'une particule sont décrits par les fonctions d'onde  $\psi_1(M, t)$  et  $\psi_2(M, t)$  alors toute combinaison linéaire  $\psi(M, t) = \lambda_1 \psi_1(M, t) + \lambda_2 \psi_2(M, t)$  décrit également un état possible.**

Ce postulat a des **conséquences considérables** et pose des **problèmes d'interprétation** à l'échelle macroscopique (chat de Schrödinger, décohérence...). Au sujet des systèmes quantiques composés d'un grand nombre de particules (phénomène de décohérence), voir : <http://toutestquantique.fr/superposition/>

## Équation de Schrödinger pour une particule libre

**Relations entre formalisme corpusculaire et formalisme ondulatoire**

Particule	Constante de Planck $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ J.s $\hbar = h/2\pi$ (cte de Planck réduite)	Onde
←		→
Quantité de mouvement $\vec{p}$	Relation de <b>de Broglie</b> $\lambda = h/p$ $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ $p = \hbar k$	Longueur d'onde $\lambda$ Vecteur d'onde $\vec{k}$
Energie $E = \frac{p^2}{2m}$	Relation de <b>Planck-Einstein</b> $E = h\nu$ $E = \hbar\omega$	Fréquence $\nu$ Pulsation $\omega$

Pour une particule en mouvement dans la direction  $\vec{e}_x$  et une onde se propageant dans cette direction, on pose (**convention de la physique quantique**) :  $\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$ .

## Équation de Schrödinger

En 1925, le physicien autrichien **Erwin Schrödinger** propose une équation obtenue grâce à une analogie (principe de correspondance) entre optique ondulatoire et mécanique. En 1928, le physicien britannique **Paul Dirac** propose une version relativiste de cette équation pour l'électron.

**Équation de Schrödinger** pour une **particule libre** :  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$ .

→ Exercice n°1

## Vitesse de groupe

La forme postulée pour la fonction d'onde  $\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$ , analogue à une OPPH, pose les mêmes problèmes qu'en physique des ondes (caractère non physique dû à une extension spatiale et temporelle infinie) : la condition de normalisation ne peut être satisfaite car  $|\psi(M, t)|^2 = A^2$  et donc  $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx \rightarrow \infty$ .

La solution adoptée réside dans la possibilité de superposer de telles ondes pour former un **paquet d'onde** limité dans le temps et l'espace :  $\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k)e^{i(kx - \omega t)} dk$  où, en pratique,  $k$  est compris dans un intervalle centré en  $k_0$  de largeur  $\Delta k$  :  $k \in \left[ k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2} \right]$ .

L'extension spatiale  $\Delta x$  de  $\psi(x, t)$  est alors liée à la  $\Delta k$  par  $\Delta x \Delta k \geq 1/2$  (relation de Fourier). On retrouve alors **l'inégalité de Heisenberg** pour le couple position / quantité de mouvement :  $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$  qui exprime **l'impossibilité** de mesurer **simultanément** ces deux grandeurs avec une **précision arbitraire** (**principe d'indétermination** dû au fait qu'une particule quantique n'est pas un corpuscule matériel et donc que les concepts attachés aux corpuscules matériels sont inopérants car inadaptés). De même, pour le couple énergie / temps :  $\Delta E \Delta t \approx \hbar$ .

→ Exercice n°2

**Une particule quantique est décrite par un paquet d'onde dont la vitesse de groupe est égale à la vitesse au sens de la mécanique classique.**

## Courant de probabilité (cf. effet tunnel)

On appelle **vecteur courant de densité de probabilité** associé au paquet d'onde  $\psi(M, t)$  le vecteur :  $\vec{j} = |\psi|^2 \vec{v}_g = \frac{|\psi|^2 \hbar k}{m} \vec{e}_x$ .

La probabilité pour cette particule de vitesse  $\vec{v}_g$  de se trouver en  $x$  entre l'instant  $t$  et l'instant  $t+dt$  est donc  $dP = \vec{j}(x, t) \cdot \vec{e}_x dt$

### Comprendre

Ce vecteur densité de courant est analogue aux densités de courants définis en thermodynamique et en mécanique des fluides :  $\vec{j} = \rho \vec{v} = \frac{dm}{d\tau} \vec{v} \leftrightarrow \vec{j} = |\psi|^2 \vec{v}_g = \frac{dP}{d\tau} \vec{v}_g$ .  
Il existe une équation de conservation de la probabilité.

## États stationnaires

Un **état stationnaire** en physique quantique est un état décrit par une fonction d'onde dont les dépendances spatiales et temporelles sont factorisées :  $\psi(x, t) = \varphi(x) f(t)$  (et non  $\frac{\partial}{\partial t} = 0$ ).

**Attention**, dans cette écriture les fonctions  $\varphi(x)$  et  $f(t)$  sont **complexes** : malgré la dénomination de « stationnaire », ces solutions ne s'identifient pas au concept d'onde stationnaire en physique des ondes pour lesquelles la factorisation est  $f(x, t) = G(x)F(t)$  où les fonctions  $F$  et  $G$  sont **réelles**. En effet,  $Re(\varphi \times f) \neq Re(\varphi) \times Re(f)$ .

## Équation de Schrödinger dans un potentiel $V(x)$ uniforme par morceaux

En physique quantique, on utilise le terme de *potentiel*  $V(x)$  pour désigner l'*énergie potentielle* (notée  $E_P$  en physique classique).

L'*équation de Schrödinger* se généralise alors sous la forme : 
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

### Modélisation du potentiel $V(x)$

Cette équation est linéaire (donc compatible avec le principe de superposition) mais à coefficients non constants (les OPPH n'en sont pas solutions) : on modélise donc la fonction potentielle par une fonction *constante par morceaux* ce qui permet de rechercher des solutions sous forme d'OPPH dans chaque domaine puis on les raccorde en utilisant des conditions de continuité aux limites.

**Admis** : pour des *états stationnaires* dans un *potentiel unidimensionnel uniforme par morceaux et borné*,  $\varphi(x)$  et  $\frac{d\varphi(x)}{dx}$  sont des *fonctions continues et bornées*.

→ Exercice n°3

### Interprétation de l'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger ci-dessus exprime la conservation de l'énergie qui s'écrirait

$$\frac{p^2}{2m} + V(x) = E \text{ en mécanique classique.}$$

### Solutions stationnaires – Résultats à connaître

→ Exercice n°4

*Les états stationnaires sont des états d'énergie constante.*

→ Exercice n°5

*Dans un état stationnaire d'énergie  $E$  :  $\psi(x, t) = \varphi(x) e^{-iEt/\hbar}$*

Il s'agit d'une onde monochromatique dont la pulsation  $\omega$  est reliée à l'énergie par la relation de Planck-Einstein :  $E = \hbar\omega$ .

### Densité de probabilité dans les états stationnaires

→ Exercice n°6

*La densité de probabilité de présence associée à un état stationnaire ne dépend pas du temps.*

### Équation de Schrödinger pour la partie spatiale $\varphi(x)$ dans un état stationnaire

→ Exercice n°7

**Etat stationnaire** : 
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V(x) \varphi(x) = E \varphi(x) \text{ et } \psi(x, t) = \varphi(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

## Propagation du paquet d'onde (complément)

Pour une particule libre ( $V = 0$ ), la relation de dispersion déduite de l'équation de Schrödinger

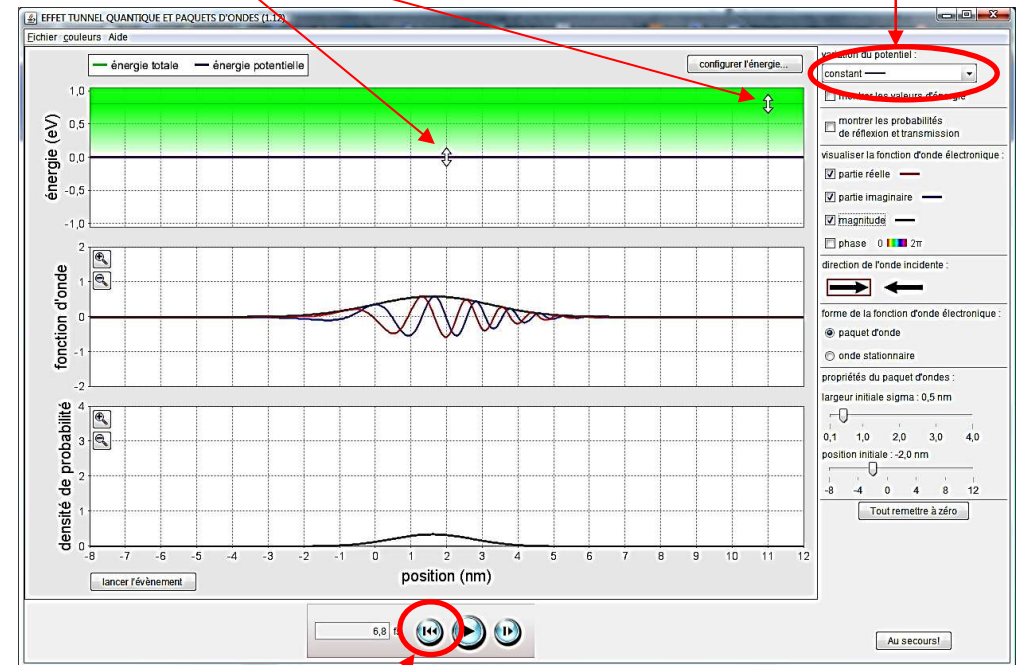
$$\text{est : } \omega(k) = \frac{\hbar}{2m} k^2.$$

La vitesse de phase  $v_\varphi(k) = \frac{\omega(k)}{k} = \frac{\hbar}{2m} k$  dépend de  $k$ , la *propagation* est donc *dispersive*.

**Simulation** - Observer la propagation du paquet d'onde grâce à l'applet :

<https://phet.colorado.edu/fr/simulation/legacy/quantum-tunneling>

Choisir un potentiel constant, une énergie potentielle nulle et une énergie totale positive (utiliser les curseurs).



Pour relancer la simulation

→ Exercice n°8