

CHAPITRE IV

Les postulats de la mécanique quantique

I Introduction

L'équation fondamentale de la dynamique $\mathbf{F} = m \gamma$ vous paraît aujourd'hui naturelle mais essayez de vous souvenir comment elle vous a été introduite.

Elle a été simplement postulée. Cette loi n'était pas naturellement évidente puisqu'elle est survenue seulement très récemment dans l'histoire de l'humanité.

Elle permet de rendre compte de toutes les expériences de la dynamique: c'est sa justification.

Vous lui connaissez toutefois des limites: elle ne rend pas compte du comportement mécanique des systèmes se déplaçant à des vitesses proches de celle de la lumière (il faut faire appel à la relativité). Elle n'est pas adaptée aux systèmes traitant de particules petites telles que l'électron (cela nécessite la mécanique quantique). Elle est totalement caduque pour les systèmes petits se déplaçant à des vitesses très grandes (c'est la mécanique quantique relativiste).

La mécanique quantique relativiste est certainement l'approche la plus générale. Dans la limite des vitesses petites elle doit donner les équations de la mécanique quantique "ordinaire". Dans la limite des systèmes de grande taille, elle doit conduire aux équations habituelles de la relativité. Enfin lorsque les deux conditions sont satisfaites, on doit retrouver la mécanique classique.

Vu de très haut, on pourrait donc postuler les principes de la mécanique quantique relativiste et, par passage à la limite, traiter tous les cas particuliers y compris la mécanique classique. C'est bien sûr une tâche démesurée et totalement inefficace.

Postuler $\mathbf{F} = m \gamma$ et en tirer toutes les conséquences mathématiques permet de résoudre de façon tout à fait satisfaisante les problèmes quotidiens de la mécanique. (Plutôt que de postuler $\mathbf{F} = m \gamma$, on peut postuler les équations de Lagrange ou le principe de moindre action, ce qui est équivalent)

Nous abordons la mécanique quantique non relativiste dans le même état d'esprit: en postulant et en tirant les conséquences mathématiques des postulats. Les postulats sont plus complexes que le simple $\mathbf{F} = m\gamma$. Mais comme cette équation, ils trouvent leur justification finale dans leur capacité à rendre compte de l'expérience. Il n'y a, à ce titre, pas de différence fondamentale d'approche.

Vous penserez sans doute de temps à autre: "où sont-ils allés chercher tout cela?", "par quel miracle l'arsenal mathématique de l'algèbre linéaire peut avoir à faire avec les expériences de la physique?"

On peut répondre en rappelant que la théorie n'a pas été bâtie en un jour, que c'est l'aboutissement de l'imagination des femmes et des hommes qui nous ont précédés. C'est le fruit d'hypothèses un peu folles, de discussions, de controverses, d'erreurs multiples et de génies inventifs.

Eh bien postulons, tirons toutes les conséquences des postulats et confrontons les prédictions à l'expérience.

II La fonction d'onde

II-1 Définition

Postulat 1

Toute particule, ou plus généralement tout système quantique, est complètement défini à l'instant t par une fonction complexe $\psi(\mathbf{r},t)$ appelée fonction d'onde.

Toutes les informations accessibles concernant le système à l'instant t se déduisent de la connaissance de ψ à cet instant.

II-2 Fonction d'onde et probabilité de présence

La première information contenue dans la fonction d'onde est la probabilité de présence de la particule :

Postulat 2

$P(\mathbf{r},t) = \psi^*(\mathbf{r},t) \psi(\mathbf{r},t)$ est la densité de probabilité de présence de la particule au point \mathbf{r} et à l'instant t

$P(\mathbf{r},t) d\mathbf{r}$ est la probabilité de trouver (si on effectue une mesure) la particule dans un élément de volume $d\mathbf{r}$ autour du point \mathbf{r} .

$\psi(\mathbf{r},t)$ est aussi appelée amplitude de probabilité de présence.

II-3 Espace des fonctions d'onde

Si une particule existe, elle est quelque part dans l'espace et donc la probabilité de la trouver en explorant tout l'espace est égale à 1. En d'autre terme, l'intégrale étendue sur tout l'espace de la densité de probabilité de présence est égal à 1.

$$\int_{\tau} \psi^*(\mathbf{r},t) \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = 1$$

$\psi(\mathbf{r},t)$ est donc à priori une fonction de carré sommable et donc appartient à l'espace \mathbb{L}^2 . En fait certaines fonctions de \mathbb{L}^2 trop irrégulières ne peuvent pas être fonction d'onde. Sans plus de précision pour l'instant, nous dirons que $\psi(\mathbf{r},t) \in \mathcal{F}$ sous espace de \mathbb{L}^2 .

\mathcal{F} est un espace vectoriel défini sur le corps \mathbb{C} des complexes. (Voir appendice A)

III Opérateurs et résultats de mesure

III-1 Toutes les informations accessibles

Nous avons affirmé que ψ renfermait toutes les informations accessibles, c'est-à-dire non seulement celles concernant la position de la particule mais aussi les informations concernant les grandeurs physiques telles que l'énergie, la quantité de mouvement, le moment cinétique etc...

Nous allons postuler comment extraire les prédictions de résultats de mesure des différentes grandeurs physiques à partir de la connaissance de la fonction d'onde.

III-2 Les seuls résultats possibles

La première étape consiste à faire, indépendamment de la fonction d'onde, le tri entre les résultats possibles et ceux qui ne le sont pas. Vous savez par exemple que le résultat de la mesure de l'énergie d'un électron dans l'atome ne peut-être qu'un des niveaux donnés par Bohr.

Postulat 3

A chaque grandeur physique A (position, énergie, moment cinétique), correspond un opérateur \hat{A} agissant dans l'espace \mathcal{F} .

Les seuls résultats de mesure possibles de la grandeur physique A sont les valeurs propres de l'opérateurs \hat{A} .

Si \hat{A} est l'opérateur associé à A , les nombres a_n tels que:

$$\hat{A} \varphi_n(\mathbf{r}) = a_n \varphi_n(\mathbf{r})$$

où $\varphi_n(\mathbf{r})$ est une fonction, sont les seuls résultats de mesure possibles.

(Les opérateurs sont à priori indépendants du temps)

III-3 Aspects mathématiques: les opérateurs hermitiens (Voir appendice A)

On admettra assez facilement que les résultats de mesure de grandeurs physiques ne peuvent être que des grandeurs réelles.

Cela impose aux valeurs propres des opérateurs associés d'être réelles. En conséquence, les opérateurs associés aux grandeurs physiques doivent être hermitiens.

Puisque les opérateurs sont hermitiens, leurs fonctions propres forment des bases sur lesquelles toutes les fonctions $\psi(\mathbf{r})$ de \mathcal{F} peuvent être développées:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_n c_n(t) \varphi_n(\mathbf{r}) \quad \text{avec} \quad c_n(t) = \langle \varphi_n | \psi \rangle = \int_{\tau} \varphi_n^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r}$$

Remarque 1

Afin de ne pas alourdir la première approche de la physique quantique, nous admettons ici que valeurs propres sont non dégénérées. Le cas tout à fait essentiel de valeurs propres dégénérées sera abordé au chapitre suivant.

Remarque 2

En fait les opérateurs associés aux grandeurs physiques font partie de la classe d'opérateurs hermitiens appelés "observables". (Voir appendice A)

III-4 Résultat d'une mesure

Pour l'instant, nous connaissons les seuls résultats de mesure possibles.

Nous voudrions savoir quel sera le résultat effectif de la mesure si le système est décrit par une fonction d'onde particulière $\psi(\mathbf{r},t)$.

La fonction d'onde du système, comme toute fonction de \mathcal{F} peut se développer de façon unique sur la base des fonctions propres de l'opérateur \hat{A} . A tout instant t , elle peut donc s'écrire:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_n c_n(t) \varphi_n(\mathbf{r})$$

C'est de la connaissance des composantes c_n que l'on peut prédire les résultats de la mesure de la grandeur physique A sur le système décrit par la fonction d'onde ψ .

Postulat 4

Soit un système décrit par la fonction d'onde $\psi(\mathbf{r},t) = \sum_n c_n(t) \varphi_n(\mathbf{r})$

La probabilité que le résultat de la mesure de la grandeur physique A soit, à l'instant t , a_p est $|c_p(t)|^2$

Ainsi connaissant la fonction d'onde, on peut prédire le résultat d'une mesure, mais on ne peut le faire qu'en terme probabiliste.

Cela rappelle l'expérience des fentes d'Young photon par photon. Il n'était possible de prévoir le point d'impact du photon ou de l'électron qu'en terme probabiliste.

En mécanique classique, la connaissance des conditions initiales des positions et des vitesses (ajoutées à celle des forces auxquelles la particule est soumise) permettait de prévoir à coup sûr le résultat de la mesure. En mécanique quantique, ce n'est plus vrai.

Il reste un cas où le résultat de la mesure est prévisible à coup sûr, c'est celui où la fonction d'onde est l'une des fonctions propres de \hat{A} . Dans ce cas l'un des c_n vaut 1 et tous les autres valent 0. Le résultat de la mesure est nécessairement le a_n correspondant.

III-5 Construction des opérateurs

Reste la lourde tâche de construire les opérateurs associés aux grandeurs physiques.

La mécanique quantique est plus générale que la mécanique classique qui s'obtient par passage à la limite. Aussi toutes les grandeurs physiques classiques ont un correspondant quantique.

L'inverse n'est pas vrai: toutes les grandeurs quantiques, susceptibles de fournir des résultats de mesure n'ont pas nécessairement un équivalent classique. Par exemple le spin d'un électron n'a pas d'équivalent classique.

En l'absence d'équivalent classique, il n'y a rien d'autre à faire que d'inventer un opérateur, ce sera le cas des opérateurs de spin. De nouveau, la seule justification de l'opérateur sera sa capacité à prédire les résultats des mesures physiques.

Si la grandeur quantique présente un équivalent classique, il existe un principe dit de correspondance que l'on justifiera à posteriori.

Ce principe privilégie deux types d'opérateurs: les opérateurs de position et les opérateurs de quantité de mouvement:

Règle 1:

A la grandeur physique X (de même Y et Z), composante de la position de la particule suivant l'axe Ox , correspond l'opérateur \widehat{X} tel que $\widehat{X} \psi(\mathbf{r},t) = x.\psi(\mathbf{r},t)$

L'application de l'opérateur \widehat{X} à une fonction $\psi \in \mathcal{F}$ donne une fonction χ égale au produit de x par ψ : $\chi(\mathbf{r},t) = x \psi(\mathbf{r},t)$

L'opérateur $\widehat{X} = x$. (lire x multiplié)

Règle 2:

A la grandeur physique P_x (de même P_y et P_z), composante de la quantité de mouvement selon l'axe Ox , correspond l'opérateur \widehat{P}_x tel que $\widehat{P}_x \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x}$. L'opérateur

$$\widehat{P}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}.$$

Règle 3:

En fait, la plupart des autres grandeurs physiques classiques s'écrivent algébriquement comme fonctions des positions et des quantités de mouvement.

Par exemple, la composante suivant Oz du moment cinétique s'écrit: $L_z = xp_y - yp_x$.

L'énergie, somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle s'écrit:

$$E = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \text{ où } V(\mathbf{r}) \text{ est une fonction simple, développable en série entière des variables de position, etc..}$$

La règle de construction des opérateurs consiste à remplacer simplement les variables classiques x, y, z, p_x, p_y, p_z par les opérateurs correspondants en respectant l'ordre d'écriture.

(Il peut y avoir, et il y aura des problèmes de commutation tout à fait essentiels)

Exemple 1: construction de \widehat{L}_z

Expression classique	x	p_y	$-$	y	p_x
	↓	↓		↓	↓
Opérateur quantique formel	\widehat{X}	\widehat{P}_y	$-$	\widehat{Y}	\widehat{P}_x
	↓	↓		↓	↓
Opérateur quantique explicite	$x.$	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$	$-$	$y.$	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

Ainsi appliqué à une fonction ψ : $\widehat{L}_z \psi = x.\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial y} - y.\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x}$

Exemple 2:

Opérateur énergie \widehat{H} (pour des raisons historiques, il ne se note pas \widehat{E}).

Imaginons une particule fixée à un ressort de constante de rappel k astreinte à se déplacer dans la direction Ox .

L'énergie cinétique est $\frac{p_x^2}{2m}$. L'énergie potentielle est $\frac{k x^2}{2}$.

L'opérateur énergie s'écrit de façon formelle:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{P}_x^2) + \frac{k \hat{X}^2}{2}$$

ce qui se traduit explicitement par:

$$\hat{H} \varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{k x^2}{2} \varphi(x)$$

Forme générale de l'opérateur hamiltonien

L'énergie s'écrit classiquement:

$$E = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

L'hamiltonien s'écrit formellement:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2) + \hat{V}(\mathbf{r})$$

Ce qui se traduit explicitement par:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r})$$

III-6 Remarques de notation:

X ou P_x sont les entités grandeurs physiques position et quantité de mouvement.

x et p_x sont les variables classiques.

\hat{X} et \hat{P}_x sont les opérateurs quantiques.

x . et $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ sont les expressions des opérateurs.

IV Mesures successives

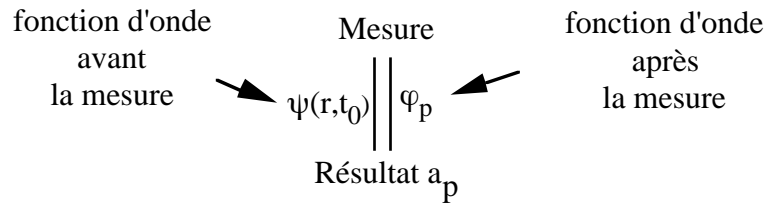
IV-1 Résultat d'une seconde mesure de la même grandeur physique

On vient d'effectuer une mesure de la grandeur physique A . On a trouvé le résultat a_p . Avant la mesure on ne savait pas à coup sûr quel résultat particulier on obtiendrait. Mais les choses sont ainsi, on a trouvé le résultat a_p , ce qui est une information.

On peut alors se poser la question suivante: quelle sera le résultat d'une nouvelle mesure de A effectuée immédiatement après la première mesure?

Postulat 5

Si le résultat de la mesure de la grandeur physique A effectuée à l'instant t_0 sur le système décrit par la fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ est a_p alors, immédiatement après la mesure, la fonction d'onde n'est plus $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ mais elle est égale à la fonction propre φ_p associée à a_p .



Cela signifie que si l'on effectue une seconde mesure de A , immédiatement après la première mesure, le résultat est à coup sûr identique au premier résultat trouvé.

Ce postulat est connu sous le terme de "réduction du paquet d'onde".

Avant la première mesure, la fonction d'onde était une somme pondérée de fonctions propres de \hat{A} , en quelque sorte un paquet de ces fonctions propres.

Après la mesure, la fonction d'onde se réduit à une seule de ces fonctions, celle correspondant au résultat de mesure.

IV-2 Notion de valeur moyenne

Pour effectuer la moyenne d'un élève on prend la somme des notes et l'on divise par le nombre de notes.

C'est en ce sens qu'il faut comprendre les valeurs moyennes dont nous allons parler.

Considérons un nombre N de particules indépendantes, toutes décrites juste avant la mesure par la même fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ et effectuons la mesure de la grandeur A sur chacune des particules.

Chacun des résultats de mesure n'est prévisible qu'en terme probabiliste (et donc dans une large part imprévisible) mais il paraît évident que si on effectue un nombre N très grand de mesure, le résultat a_p revient $N |c_p|^2$ fois, le résultat a_q revient $N |c_q|^2$ fois etc.. et la moyenne des résultats de mesure est:

$$\langle a \rangle = \frac{\sum_i a_i |c_i|^2}{\sum_i |c_i|^2} = \frac{\langle \psi | \hat{A} \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \langle \hat{A} \rangle$$

La deuxième égalité se vérifie directement en tenant compte de l'orthogonalité des fonctions d'onde φ_n .

Nous insistons bien sur le fait que les différentes mesures sont effectuées sur des particules décrites par la même fonction d'onde.

Si on ne disposait que d'une particule, et que l'on effectuait une succession de mesures sur la même particule, on trouverait un premier résultat aléatoire (parmi les possibles) mais les résultats suivants lui seraient identiques. Pour pouvoir parler de valeur moyenne, il faudrait remettre après chaque mesure la particule dans l'état décrit par la fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t_0)$

IV-3 Mesure sur un système macroscopique

Si un système macroscopique contient un grand nombre de particules toutes décrites par la même fonction d'onde ψ alors $N \langle a \rangle$ apparaît comme la valeur macroscopique de la grandeur physique A .

V L'évolution temporelle

V-1 La physique science prédictive

La moindre des choses que l'on puisse attendre d'une théorie physique est d'être prédictive, c'est à dire connaissant le système à l'instant t , déduire son comportement à l'instant $t + dt$ et par récurrence à tous les instants ultérieurs. C'est pour cette raison que les équations de la physique classique font intervenir des dérivées temporelles partielles. La connaissance des grandeurs physiques et de leurs dérivées à l'instant t permet de les connaître à l'instant $t+dt$ etc...

Que devient cette notion en physique quantique où la connaissance la plus complète que l'on puisse avoir sur un système à un instant t_0 est celle de sa fonction d'onde dont la capacité se limite à la prédiction des résultats de mesure en termes probabilistes à ce même instant ?

V-2 La prédiction quantique

La nouvelle question est donc celle-ci: comment la connaissance de la fonction d'onde à l'instant t , nous permet elle de prévoir les résultats de mesure à des instant t' ultérieurs ?

Il suffit direz-vous, connaissant la fonction d'onde à l'instant t , de pouvoir la déduire à l'instant $t+dt$ et par récurrence aux instants t' ultérieurs.

Il nous faut donc une équation liant la fonction d'onde à sa dérivée partielle temporelle.

Cette équation existe :

Postulat 6:

L'évolution spatio-temporelle de la fonction d'onde obéit à l'équation:

$$\hat{H} \psi(\mathbf{r}, t) = i \hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$$

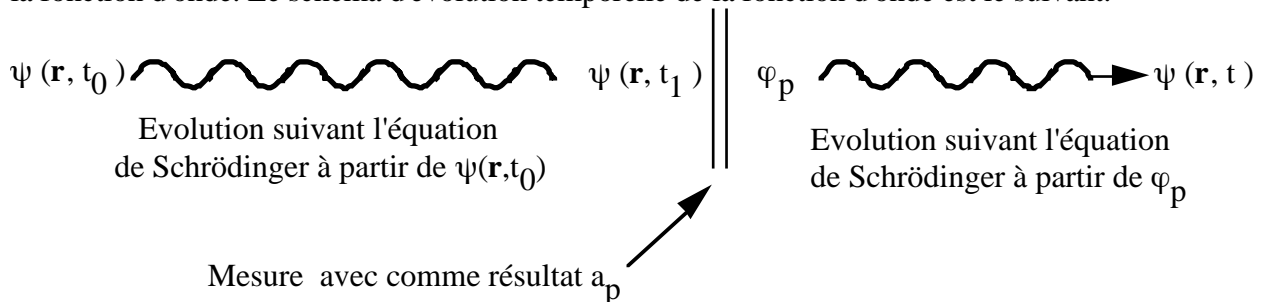
Cette équation est appelée équation de Schrödinger

Cette équation fait jouer à l'opérateur énergie \hat{H} un rôle tout à fait particulier, puisque c'est de cet opérateur et pas d'un autre que dépend l'évolution temporelle de la fonction d'onde. On retrouve là le couple " énergie-temps" déjà rencontré dans le principe d'incertitude. Nous n'irons pas plus loin dans le cadre de ce cours mais vous devez bien vous doutez qu'il y a à cela des raisons très profondes. Juste pour vous mettre en appétit... elles tiennent fondamentalement à la propriété d'homogénéité du temps.....

V-3 Evolution libre et mesure

L'évolution temporelle dont nous venons de parler est l'évolution temporelle de la fonction d'onde en l'absence de mesure.

Vous le savez, les mesures viennent troubler le système en modifiant instantanément la fonction d'onde. Le schéma d'évolution temporelle de la fonction d'onde est le suivant:



Cela signifie que connaissant la fonction d'onde à l'instant t_0 , on peut la déduire à l'instant t_1 grâce à l'équation de Schrödinger.

Si on effectue une mesure de la grandeur physique A à l'instant t_1 on obtient un résultat a_p , une des valeurs propres de \hat{A} , correspondant à la fonction propre φ_p .

Juste après la mesure, la fonction d'onde est φ_p .

A partir de cet instant la fonction d'onde évolue suivant l'équation de Schrödinger avec comme nouveau point de départ φ_p .

VI Etats stationnaires

VI-1 Evolution temporelle

Lorsque l'opérateur hamiltonien est indépendant du temps, l'équation de Schrödinger se résout simplement par séparation des variables. Pour cela on cherche des solutions de la forme: $\psi(\mathbf{r},t) = \varphi(\mathbf{r}) \eta(t)$ où $\varphi \in \mathcal{F}$ et $\eta \in \mathbb{C}$.

L'équation devient: $\eta(t) \hat{\mathbf{H}} \varphi(\mathbf{r}) = i \hbar \varphi(\mathbf{r}) \frac{\partial \eta(t)}{\partial t}$

ou en divisant chaque membre par le produit $\varphi(\mathbf{r}) \eta(t)$:

$$\frac{\hat{\mathbf{H}} \varphi(\mathbf{r})}{\varphi(\mathbf{r})} = \frac{i \hbar}{\eta(t)} \frac{\partial \eta(t)}{\partial t}$$

Le premier membre est uniquement fonction de la position \mathbf{r} , le second ne dépend que du temps t .

La seule possibilité pour que deux fonctions de variables indépendantes soient égales, est que chacune de ces fonctions soient égales à une même constante E . Il s'ensuit:

$$\frac{\hat{\mathbf{H}} \varphi(\mathbf{r})}{\varphi(\mathbf{r})} = \frac{i \hbar}{\eta(t)} \frac{\partial \eta(t)}{\partial t} = E$$

et une double équation:

$$\hat{\mathbf{H}} \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}) \quad \text{et} \quad \eta(t) = \eta_0 e^{-\frac{iE}{\hbar} t}$$

Les valeurs propres E_n de $\hat{\mathbf{H}}$ sont les solutions de la première des équations. Ce sont les résultats de mesure possibles de l'énergie.

Si on retient la valeur E_p alors :

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi_p(\mathbf{r}) \quad \text{et} \quad \eta(t) = \eta_0 e^{-\frac{iE_p}{\hbar} t}.$$

Chaque valeur propre de $\hat{\mathbf{H}}$ conduit à une solution particulière.

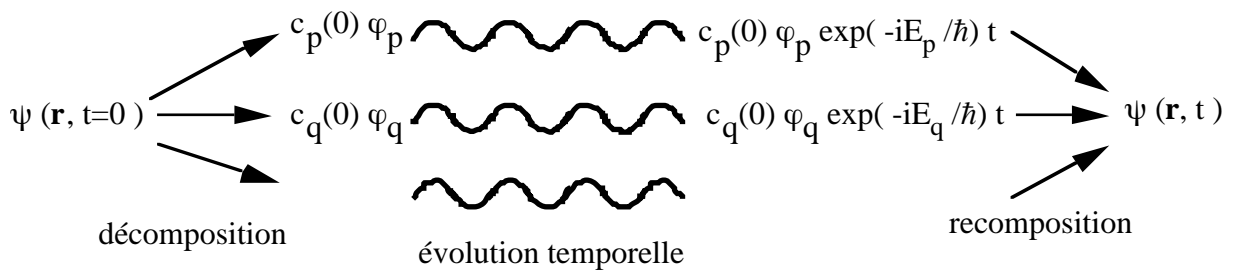
La solution générale est une combinaison linéaire des solutions particulières soit:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_n c_n e^{-\frac{iE_n}{\hbar} t} \varphi_n(\mathbf{r})$$

Cela signifie que si l'on connaît la fonction d'onde à l'instant $t = t_0$, on peut déduire son expression à un instant t ultérieur en décomposant à $t = t_0$ la fonction d'onde sur la base des fonctions propres de l'hamiltonien et en multipliant chacune des composantes par son propre facteur de phase.

$$\text{Si } \psi(\mathbf{r}, t_0) = \sum_n c_n(t_0) \varphi_n(\mathbf{r}) \quad \text{alors} \quad \psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n(t_0) e^{-\frac{iE_n}{\hbar}(t-t_0)} \varphi_n(\mathbf{r})$$

Il apparaît que la fonction d'onde totale est un paquet d'ondes élémentaires (les fonctions propres de $\hat{\mathbf{H}}$) qui évoluent indépendamment les unes des autres. Cela peut se représenter par le schéma ci-dessous.



VI-2 Etat stationnaire et valeur moyenne de l'énergie:

Si à l'instant $t = 0$, la fonction d'onde se réduit à une des fonctions propres de $\hat{\mathbf{H}}$ soit φ_p , la fonction d'onde évolue comme:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = c_p(t_0) e^{-\frac{iE_p}{\hbar}(t - t_0)} \varphi_p(\mathbf{r})$$

Et le résultat d'une mesure de l'énergie est à coup sûr E_p pour tout t .

Si à l'instant $t=0$, la fonction d'onde est quelconque, il n'en est plus de même mais la valeur moyenne de l'énergie est indépendante du temps.

En effet:

$$\langle E(t) \rangle = \frac{\langle \psi(\mathbf{r}, t) | \hat{\mathbf{H}} \psi(\mathbf{r}, t) \rangle}{\langle \psi(\mathbf{r}, t) | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle} = \sum_n |c_n(t_0)|^2 E_n = \text{Constante}$$

qui provient du fait que pour tout n :

$$|c_n(t)|^2 = |c_n(t_0)|^2$$

Les probabilités de résultat de mesure de l'énergie ne varient pas avec le temps.

VI-3 Etat stationnaire et probabilité de présence

Si à l'instant $t = 0$, la fonction d'onde se réduit à l'une des fonctions propres $\varphi_p(\mathbf{r})$ de $\hat{\mathbf{H}}$, la probabilité de présence reste $|\varphi_p(\mathbf{r})|^2$.

VII Précisions sur \mathcal{F} , continuité des fonctions d'onde et de leurs dérivées

Nous avons vu que les fonctions d'onde $\psi(\mathbf{r}, t)$ sont des éléments de \mathbb{L}^2 et nous avons signalé que seules les fonctions suffisamment régulières devaient être retenues. Nous pouvons apporter maintenant quelques précisions et dire pourquoi les fonctions d'onde et leurs dérivées doivent être continues.

VII-1 Aspect mathématique

Les fonctions d'onde obéissent à l'équation de Schrödinger qui vu la forme générale de l'hamiltonien (§ II-7) fait intervenir un laplacien et donc des dérivées secondes de l'espace.

La moindre des choses est que ces dérivées secondes soient définies et pour cela, que les fonctions d'onde fassent partie du sous espace de \mathcal{F} dont les fonctions et leurs dérivées premières sont continues.

VII-2 Aspect physique

De façon générale, sauf modélisation mathématique, les grandeurs physiques ne varient jamais brutalement et ne sont pas discontinues.

On peut imaginer qu'il en est ainsi de la densité de probabilité de présence.

La continuité de $P(\mathbf{r},t) = \psi^*(\mathbf{r},t) \psi(\mathbf{r},t)$ implique la continuité de la fonction d'onde à tout instant. (En toute rigueur de sa norme).

On peut penser aussi que le flux de densité de probabilité de présence $\mathbf{J}(\mathbf{r},t)$ est continu.

Ce flux est défini à partir de la dérivée première de la fonction d'onde par:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r},t) = \frac{\hbar}{2m} \left[\psi^* \mathbf{grad} \psi - \psi \mathbf{grad} \psi^* \right]$$

$\mathbf{J}(\mathbf{r},t)$ est un courant de probabilité de présence. Il obéit à l'équation de conservation:

$$\text{div} \mathbf{J}(\mathbf{r},t) + \frac{\partial P(\mathbf{r},t)}{\partial t} = 0$$

(cela se montre à partir de l'équation de Schrödinger), qui est à rapprocher de

$$\text{div} \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

équation de conservation des charges électriques où ρ est la densité de charge et $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$ est la densité de courant électrique.

Ce flux ne peut être discontinu, ce qui nécessite la continuité des dérivées premières de la fonction d'onde.

VIII- Retour sur l'onde plane sinusoïdale infinie

VIII-1 Particule libre

Une particule est dite libre si elle est soumise à un potentiel nul en tout point de l'espace. La seule énergie qui puisse lui être attribuée est l'énergie cinétique.

En se restreignant à une dimension, l'opérateur hamiltonien s'écrit:

$$\hat{\mathbf{H}} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Et l'équation de Schrödinger:

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

Cherchons des solutions à variables séparées:

$$\psi(x,t) = \varphi(x) \eta(t)$$

Soit:

$$- \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x^2} = E \varphi(x) \quad \text{et} \quad \eta(t) = \eta_0 e^{-\frac{iE}{\hbar} t}$$

Et posons

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Il s'ensuit une solution de la forme:

$$\varphi_k(x) = A \exp i k x$$

et donc

$$\psi_k(x,t) = A \exp -i \left(\frac{E(k)}{\hbar} t - k x \right)$$

qui est l'onde sinusoïdale plane infinie, compatible avec $E=\hbar\omega$ et $p=\hbar k$.

VIII-2 Quantité de mouvement

Or $\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp i k x$ est solution de l'équation :

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} = \hbar k \varphi(x)$$

qui est l'équation aux valeurs propres de l'opérateur $\hat{P}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

Cela signifie que si une particule est décrite par la fonction d'onde $\psi_k(x,t) = \varphi_k(x) \eta(t)$, le résultat d'une mesure de la quantité de mouvement est $\hbar k$ à coup sûr.

La vitesse de groupe est par ailleurs égale à $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m}$.

VIII-3 Paquet d'ondes.

La probabilité de présence d'une particule décrite par la fonction d'onde sinusoïdale infinie $\psi_k(x,t) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \exp -i \left(\frac{E(k)}{\hbar} t - k x \right)$ est égale à $\frac{|A|^2}{2\pi}$, c'est à dire qu'elle est uniforme dans tout l'espace.

Cela constitue une difficulté car $\psi_k(x,t)$ n'est pas de carré sommable et ne rentre pas dans le cadre du formalisme que nous venons de développer.

Cependant puisque toutes les fonctions du type $\psi_k(x,t) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \exp -i \left(\frac{E(k)}{\hbar} t - k x \right)$ sont solutions de l'équation de Schrödinger de la particule libre.

leurs combinaisons linéaires discrètes:

$$\psi(x,t) = \sum_k A(k) \exp - i \left(\frac{E(k)}{\hbar} t - k x \right)$$

ou continues:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int A(k) \exp - i \left(\frac{E}{\hbar} t - k x \right) dk$$

le sont aussi.

Ces combinaisons linéaires continues sont normalisables (si $A(k)$ l'est) et font sans problème partie de \mathcal{F} .

VIII-4 Base continue

A tout instant ($t_0 = 0$) par exemple,

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int A(k) \exp (i k x) dk = \int A(k) \varphi_k(x) dk$$

où:

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(x) \exp(-ikx) dx = \int \varphi_k^*(x) \psi(x) dx$$

est une combinaison linéaire continue des fonctions propres de l'opérateur quantité de mouvement $\varphi_k(x)$. Cela est à rapprocher de la décomposition de ψ sur les fonctions propres discrètes de l'opérateur \hat{A} :

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \varphi_n(\mathbf{r})$$

Aussi, de même que le résultat de la mesure de A effectuée sur une particule décrite par la fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$ est a_n avec la probabilité $|c_n|^2$, le résultat de mesure de la quantité de mouvement sur une particule décrite par un paquet d'ondes planes sinusoïdales infinies est $\frac{\hbar k}{m}$ avec la densité de probabilité $|A(k)|^2$

Ce qui correspond précisément au développement effectué au chapitre III.

Le dernier pas mathématique à franchir est de dire que les $\{\exp ikx\}$ forment une base continue. C'est un pas que nous franchissons et qui revient à dire que la décomposition de Fourier d'une fonction est une décomposition de cette fonction sur la base continue des ondes planes sinusoïdales infinies.

La difficulté est que la fonction d'onde appartient à \mathcal{F} et que les fonctions de la base continue sur laquelle elle est développée ne sont pas de carré sommables et sont externes à \mathcal{F} légère difficulté mathématique.

Une correspondance est donnée dans le tableau ci-dessous:

	Base discrète	Base continue
Grandeur physique	A	quantité de mouvement P_x
Opérateur associé	\hat{A}	$\hat{P}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$
Equation aux valeurs propres	$\hat{A} \varphi_n(x) = a_n \varphi_n(x)$	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi_k(x)}{\partial x} = \hbar k \varphi_k(x)$
Fonctions propres	$\varphi_n(x)$	$\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp i k x$
Indice	discret n	continu k
Décomposition de $\psi(x)$ à un instant t_0	$\sum_n c_n \varphi_n(x)$	$\int A(k) \varphi_k(x) dk$
Coefficients de la décomposition	$c_n = \int \varphi_n^*(x) \psi(x) dx$	$A(k) = \int \varphi_k^*(x) \psi(x) dx$
Résultat d'une mesure:	a_n	$\hbar k$
avec	Probabilité: $ c_n ^2$	Densité de probabilité $ A(k) ^2$

VIII-3 Quel sens donner à l'onde plane sinusoïdale infinie?

Reprenons l'expression spatio-temporelle de l'onde plane sinusoïdale infinie:

$$\psi(x,t) = A \exp -i \left(\frac{E}{\hbar} t - k x \right)$$

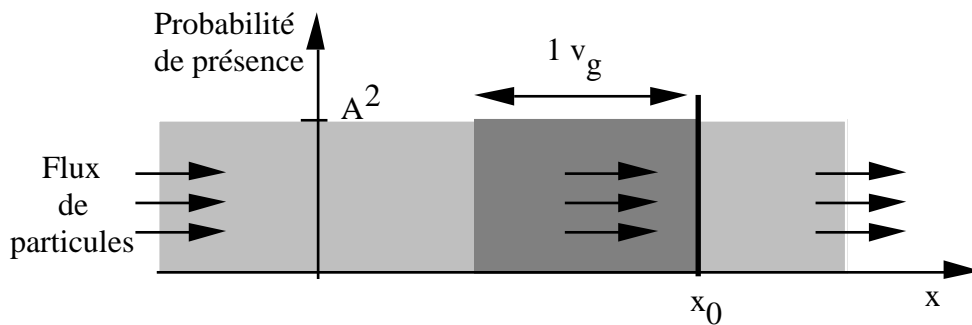
Elle correspond à une densité de probabilité de présence $|A|^2$

et à une vitesse de particule $\frac{\hbar k}{m}$

Appliquée à une particule cette fonction d'onde qui n'est pas de carré sommable perd son sens.

Appliquée à un nombre infini de particules, elle retrouve une signification en interprétant $|A|^2$ comme une densité moyenne de particules possédant la quantité de mouvement $p = \hbar k$ et se "déplaçant" à la vitesse $v = v_g = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m}$.

L'onde plane sinusoïdale infinie peut être interprétée comme associée à un flux permanent de particules.



Soit S une surface (vue de profil) disposée en x_0 perpendiculairement à la direction Ox .

Le nombre dN de particules qui franchissent cette surface entre les instant t et $t+dt$ est égal au nombre de particules qui étaient "comprises" à l'instant t dans le volume V situé entre les cotes x_0 et $x_0 - v_g dt$, c'est à dire à:

$$dN = |A|^2 V = |A|^2 S v_g dt$$

Le nombre de particules qui traverse la surface située en x_0 par unité de temps est appelé flux de particule Φ . Ramené à l'unité de surface de barrière, il s'appelle courant de particule J .

$$J = \frac{\Phi}{S} = v_g |A|^2 = \frac{\hbar k}{m} |A|^2$$

Il est à noter que cette valeur de J à une dimension se déduit aussi de l'expression générale de la densité de courant de particules:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r},t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi^* \mathbf{grad} \psi - \psi \mathbf{grad} \psi^* \right]$$