

Fonction d'onde et équation de SCHRÖDINGER

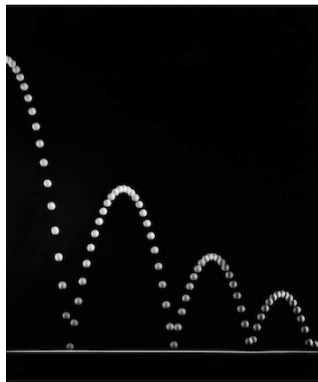
A. Naissance de la mécanique quantique

A.1 Description classique

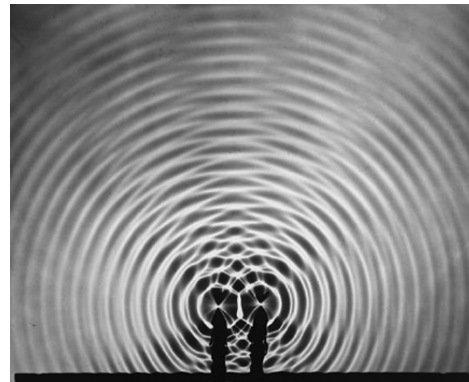
Dans le monde classique, deux possibilités existent pour modéliser les phénomènes.

A.1.1 Corpuscule

Une particule (ou corpuscule), caractérisée par sa masse m et sa vitesse $\vec{v}$, est par essence localisée par ses coordonnées de position et de vitesse. On connaît la position de la particule à chaque instant (planète, atome, électron...). La loi fondamentale (PFD) permet de mettre en équation le système. Les conditions initiales permettent de déterminer la position future à chaque instant, la trajectoire. Cette description est profondément *déterministe*.



(a) Trajectoire d'une balle



(b) Interférence d'ondes de surface

FIGURE 1 – Les deux approches classiques

A.1.2 Onde

Dans l'approche ondulatoire, le domaine est étendu. Une onde est caractérisée par sa fréquence ν ou sa longueur d'onde λ ($\lambda = \frac{c}{\nu}$). On pense ici aux ondes lumineuses notamment. Les équations fondamentales de MAXWELL permettent de décrire parfaitement le phénomène. Associées à des conditions initiales, on peut déterminer le devenir de l'onde. Là encore, l'approche est *déterministe*.

A.1.3 Contradiction et point commun

Dans la physique classique, il y a une opposition entre onde et corpuscule, dans la localisation notamment... Pour autant, les deux approches sont déterministes : c'est la raison d'être de la physique classique.

Certains faits expérimentaux mettent cependant à mal cette physique classique au début du XX^e.

A.2 Comportement corpusculaire de la lumière

A.2.1 Le rayonnement du corps noir

A la fin du XIX^e, KELVIN pensait que toute la physique était aboutie et que l'univers était explicable par les lois de la physique classique (mécanique, électromagnétisme et thermodynamique). Seul « un petit nuage subsiste », l'explication du rayonnement du corps noir. Un corps noir est une entité théorique qui absorbe, sans la réfléchir ni la diffuser, toute l'énergie électromagnétique qu'il reçoit. Ainsi, une boîte avec une toute petite ouverture est généralement une bonne approximation d'un corps noir. Un tel "corps noir" reçoit de l'énergie, s'il n'en émettait pas, sa température augmenterait indéfiniment... Ceci est irréaliste, un corps noir réémet donc l'énergie qu'il a absorbée sous forme de rayonnements électromagnétiques. La quantité d'énergie réémise dépend de sa température.

Le spectre d'émission d'un corps noir dépend uniquement de sa température comme le montrent les spectres de la figure 2a et l'animation suivante.

L'étude du corps noir a permis à WIEN d'énoncer en 1896 une loi qui porte son nom : la longueur d'onde du maximum d'émission $\lambda_{\max}$ est inversement proportionnelle à la température T du corps noir.

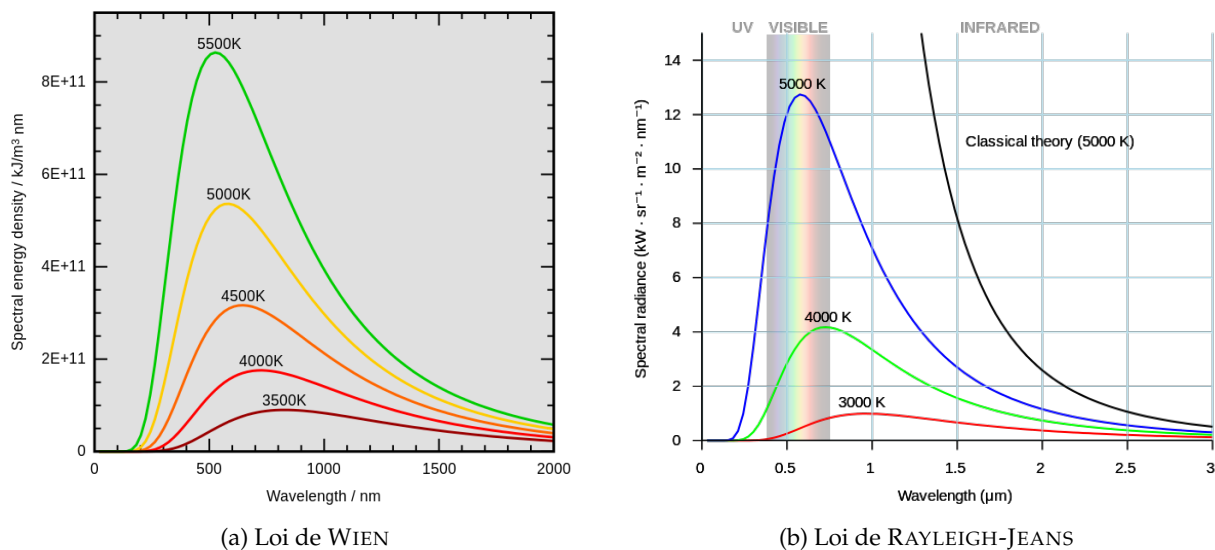


FIGURE 2 – Profils de rayonnement du corps noir

Cependant, les études classiques (basées sur la thermodynamique statistique) effectuées par RAYLEIGH et JEANS rendent correctement compte de ce qui se produit à basse fréquence, mais diverge totalement pour les hautes fréquences (voir (2b)! Ceci est en contradiction totale avec les faits expérimentaux : n'importe quel corps chauffé devient alors une bombe énergétique.

Conservant les idées de la thermodynamique statistique à laquelle il ne croit pas, Max PLANCK (1900) propose ce qui est d'abord une astuce (il l'appelle d'ailleurs « truc ») mathématique : le rayonnement émis par le corps noir ne peut s'échanger que par paquets d'énergie (les intégrales deviennent des sommes) proportionnelle à la fréquence des radiations. PLANCK définit ainsi le quantum énergétique $\varepsilon = h\nu$. La constante h est notée ainsi car PLANCK appelait à l'aide (*hilfe*). Il propose alors une densité spectrale de la forme suivante :

$$u(\nu, T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

La seule variable d'ajustement pour faire coïncider cette relation avec l'expérience est h . Pour coller parfaitement à l'expérience, il retient alors la valeur $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ J.s. Tout ceci se passe dans un quasi-anonymat : l'idée de PLANCK n'est reprise pour la première fois qu'en 1905 par EINSTEIN.

A.2.2 L'effet photoélectrique

L'effet photoélectrique a été observé la première fois par l'allemand HERTZ dans la seconde moitié du XIX^e, mais reste, au début du XX^e, inexplicable grâce à la physique classique.

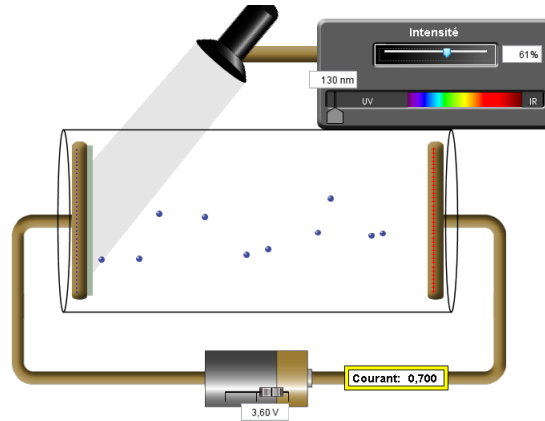


FIGURE 3 – Effet photoélectrique - Montage

Lors de cette expérience, on cherche à arracher des électrons à une électrode en la soumettant à une radiation lumineuse.

- On la bombarde de lumière de grande longueur d'onde λ donc de faible fréquence ν : aucun courant ne circule.
- Classiquement, en augmentant l'intensité lumineuse (amplitude de l'onde EM), on pense arracher des électrons et faire naître un courant : aucun courant ne circule.
- On repasse à une intensité lumineuse moyen faible. Il faut faire varier la fréquence ν du rayonnement pour arracher des électrons. Il ne se produit rien au dessous d'une fréquence seuil ν_s .
- Augmenter la fréquence augmente le courant. Cela n'augmente que l'énergie cinétique des électrons émis, mais pas leur nombre...
- Augmenter l'intensité lumineuse augmente le courant. Cela n'augmente que le nombre des électrons émis, mais pas leur vitesse.
- La valeur de la fréquence seuil ν_s dépend du matériau qui compose l'électrode.

Élément chimique	K	Na	Mg	Pb	Cu	Fe	Pt
Travail d'extraction $h\nu_s$ (eV)	2,29	2,36	3,66	4,25	4,48	4,67	5,64

TABLE 1 – Influence de la nature de l'électrode

En 1905, EINSTEIN réinvestit les travaux de PLANCK et pousse plus loin : la lumière ne se contente pas d'échanger avec la matière par quantum d'énergie, elle est constituée de quanta d'énergie $h\nu$. L'effet photoélectrique met en lumière que les échanges énergétiques ne peuvent se faire que par paquet d'énergie, portés par des photons. Il faut bien comprendre ce phénomène comme celui d'une interaction entre 1 photon et 1 électron.

Il devient alors plus aisé d'interpréter les phénomènes observés :

1. Si la fréquence ν est trop faible, le quantum d'énergie $h\nu$ est trop faible pour arracher un électron et augmenter l'intensité du rayonnement ne fait qu'augmenter le nombre de quanta bombardant l'électrode, chacun étant trop faible pour arracher un électron.
2. Pour arracher un électron, il faut que l'énergie du quantum soit au minimum $h\nu_s$. C'est ce qu'on appelle le travail d'extraction $W = h\nu_s$.
3. Si on augmente la fréquence, le surplus d'énergie $h(\nu - \nu_s)$ est transmis à l'électron qui augmente son énergie cinétique, donc l'intensité du courant.
4. Si on augmente l'intensité lumineuse, on accroît le nombre de quanta, donc le nombre d'électrons arrachés, et naturellement, l'intensité du courant.

EINSTEIN reçut le prix Nobel en 1921 pour ces travaux. Le terme de **photon** n'apparut qu'en 1926.

A.3 Comportement ondulatoire de la matière

En 1923, considérant que ce qui était vu comme une onde est maintenant envisagé comme particule, le français Louis DE BROGLIE émet l'hypothèse que ce qui est particule pourrait bien se comporter comme une onde. A une particule de quantité de mouvement $\vec{p}$, il associe une longueur d'onde donnée par la relation de DE BROGLIE :

$$\begin{cases} \vec{p} = \hbar \vec{k} \\ \lambda_{DB} = \frac{h}{p} \end{cases} \quad (1)$$

L'expérience des fentes d'YOUNG réalisée avec des électrons dans les années 1980 valide le comportement ondulatoire des électrons.

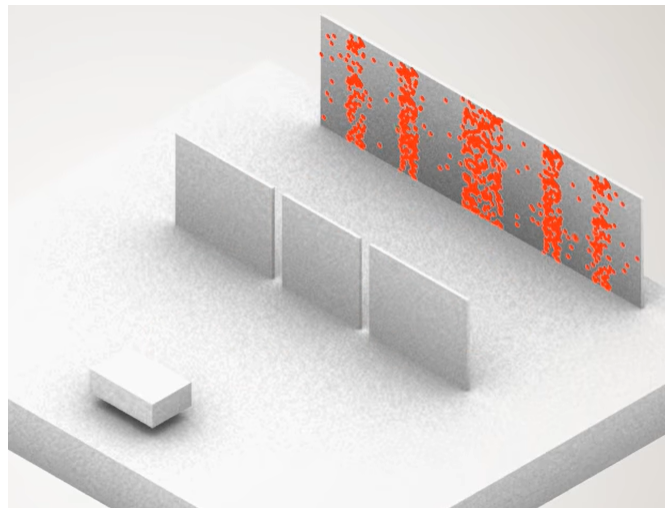
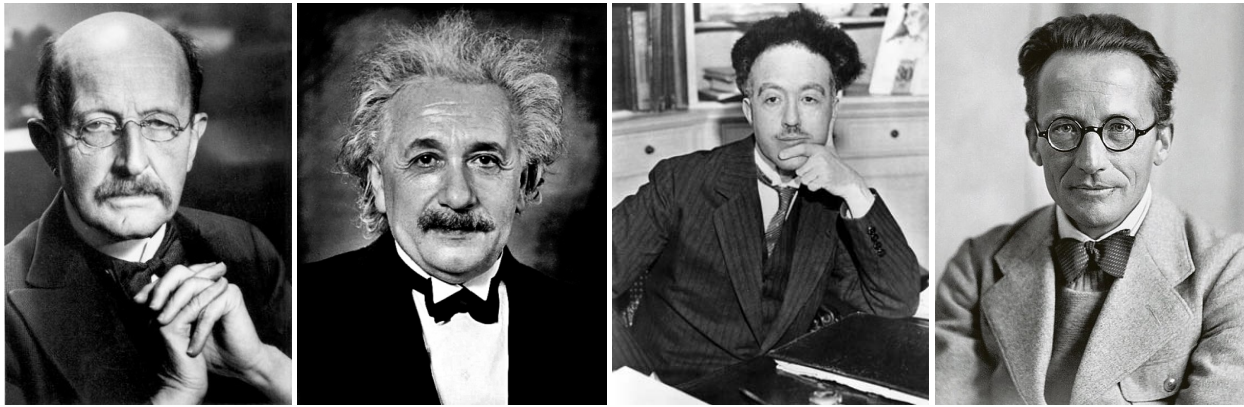


FIGURE 4 – Interférences électroniques

C'est le thème de l'extrait d'une conférence de Julien BOBROFF (16'46" à 23'50") : Interférences électroniques

A.4 Dualité onde-corpuscule

La lumière classiquement modélisée comme une onde présente un comportement corpusculaire. Des électrons, classiquement modélisés comme des corpuscules (mécanique), présentent des propriétés directement liées à un comportement ondulatoire. Les éléments étudiés se comportent *à la fois* comme des corpuscules et comme des ondes : on parle alors de **dualité onde-corpuscule**.



(a) Max PLANCK

(b) Albert EINSTEIN

(c) Louis DE BROGLIE

(d) Erwin SCHRÖDINGER

FIGURE 5 – Quelques contributeurs au développement de la mécanique quantique

Le sujet d'étude est appelé **quanton** et défini par sa quantité de mouvement $\vec{p}$ et sa longueur d'onde λ_{DB} , les deux étant liés par la constante de PLANCK h . Ce quanton est aussi défini par son énergie $\mathcal{E}$ et sa fréquence ν .

Propriété MQ1.1 - Quanton et grandeurs caractéristiques

Un quanton est un objet quantique caractérisé par des grandeurs "corpusculaires" (sa quantité de mouvement $\vec{p}$ et son énergie $\mathcal{E}$) et des grandeurs "ondulatoires" (sa longueur d'onde de DE BROGLIE λ_{DB} , son vecteur d'onde $\vec{k}$ et sa fréquence ν) reliées par la constante de PLANCK h :

$$\mathcal{E} = h\nu = \hbar\omega \quad (\text{PLANCK-EINSTEIN}) \quad \text{et} \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} \quad \text{et} \quad \lambda_{DB} = \frac{h}{p} \quad (\text{DE BROGLIE})$$

B. Fonction d'onde

B.1 Quanton et fonction d'onde

Un quanton est décrit en physique quantique par une **fonction d'onde** notée habituellement Ψ à valeurs complexes : $(\vec{r}, t) \rightarrow \Psi(\vec{r}, t) \in \mathbb{C}$. Cette fonction d'onde est un champ scalaire. La fonction d'onde contient toute l'information qu'il est possible de connaître sur le quanton dans l'état quantique considéré.

La fonction d'onde Ψ est une **fonction fondamentalement complexe**. Il est important de bien la différencier de la « notation complexe » utilisée pour linéariser une équation (électricité, mécanique, électromagnétisme) qui n'est qu'un artifice de calcul extrêmement pratique.

Dans le cas à une dimension (1D), très utile pour les applications réalisées en MP, la fonction d'onde est une fonction d'un variable spatiale, x le plus souvent : $\Psi(x, t)$.

B.2 Probabilité de présence

B.2.1 Cas général (3D)

La fonction d'onde Ψ permet de déterminer la probabilité de détecter la particule dans un volume donné, au cours d'une mesure. En effet, le module au carré de la fonction d'onde définit la **densité de probabilité**

de présence $\rho(\vec{r}, t)$.

$$\rho(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (2)$$

Ainsi, la probabilité dp de détecter, lors d'une mesure, le quanton de fonction d'onde Ψ dans un volume élémentaire $d\tau$ vaut :

$$dp = \rho(\vec{r}, t) d\tau = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau \quad (3)$$

Logiquement, la probabilité p de détecter la particule de fonction d'onde Ψ dans un volume τ vaut :

$$p = \iiint_{\tau} \rho(\vec{r}, t) d\tau = \iiint_{\tau} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau$$

On remarque que la fonction d'onde possède une *unité* et que, dans un cas tridimensionnel, Ψ s'exprime en $m^{-\frac{3}{2}}$.

La probabilité de trouver quelque part dans l'espace une particule existante est nécessairement égale à 1. C'est ce que l'on nomme **condition de normalisation** :

$$\iiint_{\text{espace}} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau = 1 \quad (4)$$

B.2.2 Cas unidimensionnel

Pratiquement, on ne considérera que des cas unidimensionnels. Dans ce cas, la fonction d'onde Ψ est $\Psi(x, t)$. La densité de probabilité de présence est alors $\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$.

La condition de normalisation dans un tel cas s'écrit alors $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$. On comprend aisément que $\Psi(x, t)$ s'exprime alors en $m^{-\frac{1}{2}}$.

C. Équation de SCHRÖDINGER

C.1 Énoncé

En 1926, Erwin SCHRÖDINGER propose l'équation que doit satisfaire la fonction d'onde et qui porte son nom : **l'équation de SCHRÖDINGER**.

Loi MQ1.1 - Équation de SCHRÖDINGER

La fonction d'onde d'une particule de masse m satisfait l'équation aux dérivées partielles suivante :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \quad (5)$$

$V(\vec{r}, t)$ est le champ d'énergie potentielle dans lequel évolue le quanton considéré. Usuellement, cette énergie potentielle est appelé potentiel, à ne surtout pas confondre avec le potentiel électrostatique (noté V lui aussi).

Dans le cas d'un problème à une dimension, l'équation de SCHRÖDINGER prend la forme suivante :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi(x, t) \quad (6)$$

C.2 Linéarité de l'équation de SCHRÖDINGER et superposition

L'équation de SCHRÖDINGER est linéaire : si Ψ_1 et Ψ_2 sont deux états possibles, c'est-à-dire deux solutions de l'équation (5), alors $\Psi_1 + \Psi_2$ est un état possible (moyennant une opération de normalisation). La superposition de deux états possibles du système (1 et 2) est un état possible du système.

La démonstration est immédiate (à 1D) :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial (\Psi_1 + \Psi_2)}{\partial t} &= i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} + i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 (\Psi_1 + \Psi_2)}{\partial x^2} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} \\ V(\Psi_1 + \Psi_2) &= V\Psi_1 + V\Psi_2 \end{aligned}$$

Conséquence : exemple de l'atome d'hydrogène (figure 9)

Intéressons-nous à l'électron d'un atome d'hydrogène. Les solutions de l'équation de SCHRÖDINGER sont les différentes orbitales atomiques bien connues en chimie : 1s, 2s, 2p, 3s, ... A chacun de ces états quantiques correspond donc une fonction d'onde, une probabilité de présence et une énergie déterminée. Par exemple, on définit Ψ_{1s} définissant l'orbitale fondamentale.

La linéarité de l'équation de SCHRÖDINGER implique que l'état défini par la fonction d'onde $\frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{1s} + \Psi_{2p})$ est un autre état quantique parfaitement acceptable.

Dans ce cas, l'électron n'a ni une probabilité de présence déterminée, ni une énergie déterminée. En revanche, une mesure de l'une de ces grandeurs fournira un unique résultat (1s ou 2p), avec une probabilité calculable à partir de la fonction d'onde (réduction du paquet d'onde vers l'évènement le plus probable).

C.3 Solutions stationnaire de l'équation de SCHRÖDINGER

C.3.1 Etat stationnaire

On appelle état stationnaire une solution de l'équation de SCHRÖDINGER dont la fonction d'onde Ψ se factorise sous la forme d'un produit d'une fonction du seul temps $\chi(t)$ par une fonction de la variable spatiale uniquement $\varphi(x)$, soit :

$$\Psi(x, t) = \varphi(x) \chi(t) \quad (7)$$

Une situation d'étude est stationnaire si le potentiel $V(x, t)$ ne dépend pas du temps, soit $V(x, t) = V(x)$.

C.3.2 Séparation des variables

Lorsqu'on injecte la solution stationnaire dans l'équation 6, on obtient :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial (\varphi(x)\chi(t))}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 (\varphi(x)\chi(t))}{\partial x^2} + V(x) (\varphi(x)\chi(t)) \\ i\hbar \varphi(x) \chi'(t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) \chi(t) + V(x) \varphi(x) \chi(t) \end{aligned}$$

On sépare ensuite les variables en regroupant à gauche les grandeurs dépendantes du temps t et à gauche celle qui sont fonction de la variable position x . Sous la condition que φ et χ ne s'annulent pas :

$$i\hbar \frac{\chi'(t)}{\chi(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} + V(x) \quad \forall x, t$$

Cette équation est donc nécessairement une constante de x et de t .

$$i\hbar \frac{\chi'(t)}{\chi(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} + V(x) = \text{cste}$$

La résolution liée à la partie temporelle impose que le rapport $\frac{\chi'(t)}{\chi(t)}$ soit homogène à une pulsation ω . On note donc $\hbar\omega$ cette constante et on a donc :

$$i\hbar \frac{\chi'(t)}{\chi(t)} = \hbar\omega$$

Soit

$$\begin{aligned}\chi'(t) &= -i\omega\chi(t) \\ \chi(t) &= A \exp(-i\omega t)\end{aligned}\quad (8)$$

Ainsi, la dépendance temporelle d'un état stationnaire est caractérisé par une pulsation ω et, grâce à la relation de PLANCK, une énergie $E = \hbar\omega = h\nu$. Les fonctions d'onde $\Psi(x, t)$ sont donc de la forme

$$\Psi(x, t) = \varphi(x) \exp(-i\omega t) = \varphi(x) \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)$$

Résultat MQ1.1 - Équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps

La partie spatiale satisfait l'équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps (Time Indépendant SCHRÖDINGER Equation ou TISE) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (9)$$

C.3.3 Signification de l'état stationnaire

Etant donné que la forme de la fonction d'onde est $\Psi(x, t) = \varphi(x) \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)$, il apparaît que

$$|\Psi(x, t)|^2 = \left| \varphi(x) \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right) \right|^2 = |\varphi(x)|^2 = \rho(x)$$

La distribution de probabilité de présence, dans le cas stationnaire, ne dépend pas du temps : $|\Psi(x, t)|^2 = \rho(x)$.

Remarques

1. La normalisation de la fonction d'onde revient donc à normaliser la partie spatiale :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1$$

2. Il ne faut pas confondre l'état quantique stationnaire (C) avec les ondes stationnaires évoquées en électromagnétisme notamment.

D. Particule libre

Une particule est dite libre si elle ne subit aucun potentiel, donc si

$$V(x) = 0 \quad \forall x$$

D.1 Solutions stationnaires

Réolvons l'équation de SCHRÖDINGER (9) pour déterminer les états stationnaires associés à une énergie E . On a donc :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} &= E\varphi(x) \\ \varphi''(x) &= -\frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) \end{aligned}$$

On identifie $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ le vecteur d'onde associé à l'énergie E , qui est forcément positive, puisque purement cinétique. On obtient alors l'équation différentielle type oscillateur harmonique :

$$\varphi''(x) + k^2 \varphi(x) = 0$$

dont les solutions sont $\varphi(x) = A \exp(+ikx) + B \exp(-ikx)$ où A et B sont des constantes. L'expression complète de la fonction d'onde est donc la suivante :

$$\Psi(x, t) = A \exp(-i(\omega t - kx)) + B \exp(-i(\omega t + kx))$$

On reconnaît là l'expression de la superposition d'une onde plane monochromatique progressant dans le sens de x croissants $A \exp(-i(\omega t - kx))$ et d'une onde plane monochromatique progressant dans le sens de x décroissants $B \exp(-i(\omega t + kx))$.

D.2 Normalisation

Les états stationnaires d'une particule quantique libre sont des OPPM. Dans cette situation, une solution du type $\Psi(x, t) = A \exp(-i(\omega t - kx))$ correspond à une densité de probabilité de présence $\rho(x) = |A|^2$ qui est uniforme dans tout l'espace. Une telle fonction ne peut en aucun cas être normalisée, car $\int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 dx$ est nécessairement divergente. Elle n'a donc, en toute rigueur, pas de réalité physique.

En revanche, une superposition d'OPPM, formant un paquet d'ondes, peut être normalisée.

D.3 Densité de courant de probabilité $\vec{j}$

L'étude de la densité de probabilité de présence $\rho(x) = |\Psi(x, t)|^2$ ne permet pas de faire la différence entre une OPPM se déplaçant vers les $x > 0$ et une OPPM se déplaçant vers les $x < 0$; dans les deux cas, la densité de probabilité est uniforme.

On définit donc la grandeur vectorielle $\vec{j}$, appelée **densité de courant de probabilité**, dirigée dans le sens de propagation $\vec{k}$, telle que :

$$\vec{j}(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m} \quad (10)$$

Un calcul non exigible permet, à partir de l'équation de SCHRÖDINGER, d'obtenir une équation locale traduisant la conservation de la probabilité. A une dimension, on a

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = 0$$

On remarque que cette équation est similaire à l'équation de conservation de la charge démontrée en électromagnétisme (voir tableau 2).

	Densité volumique	Courant volumique	Équation de conservation
charge	ρ	$\vec{j} = \rho \vec{v}$	$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0$
probabilité	$ \Psi ^2$	$\vec{j}(x, t) = \Psi ^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$	$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0$

TABLE 2 – Analogie entre transport de charge et transport de probabilité

Pour pousser la comparaison, on peut noter que, pour une particule quantique, $\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\hbar \vec{k}}{m}$. Ainsi, $\vec{j} = \rho \vec{v} = |\Psi|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$.

E. Relations d'indétermination d'HEISENBERG

E.1 Énoncés

Inégalité spatiale On ne peut attribuer simultanément à une particule quantique une position rigoureusement précise et une quantité de mouvement rigoureusement précise. Il existe une limitation intrinsèque qui impose une indétermination sur x et sur p_x :

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (11)$$

Ne pouvant connaître précisément où est située la particule et quelle est sa vitesse, la notion de trajectoire est de fait impossible.

Inégalité temporelle L'indétermination sur l'énergie ΔE diminue lorsque la durée caractéristique du système τ augmente.

$$\tau \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \quad (12)$$

Il en découle le résultat suivant : l'énergie d'un état stationnaire, dont le temps caractéristique τ est infini, est parfaitement définie.

E.2 Localisation du paquet d'onde

E.2.1 Cas d'un état stationnaire

Dans le cas d'un état stationnaire, la densité de probabilité de présence $\rho(x)$ est uniforme. La particule quantique n'est donc pas du tout localisée, soit $\Delta x \rightarrow \infty$. Par conséquent, son vecteur d'onde k est parfaitement connu : $\Delta k \rightarrow 0$.

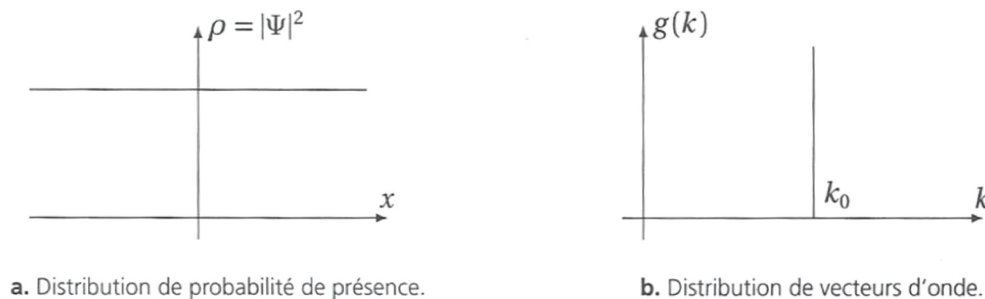


FIGURE 6 – Cas de l'OPPM

E.2.2 Superposition de deux OPPM

On considère la superposition de deux états quantiques associés respectivement aux énergies E_1 et E_2 , donc de vecteurs d'onde k_1 et k_2 . On a donc $\Psi(x, t) = \frac{A}{\sqrt{2}} [\exp(-i(\omega_1 t - k_1 x)) + \exp(-i(\omega_2 t - k_2 x))]$. Lorsqu'on effectue le calcul de la densité de probabilité de présence, on obtient un résultat dépendant du temps t et de la position x : $\rho(x, t) = |A|^2 [1 + \cos((\omega_1 - \omega_2)t - (k_1 - k_2)x)]$.

Alors que le spectre s'étend en vecteur d'onde (Δk augmente, donc Δp augmente), la localisation de la particule se précise : à chaque instant, il y a des lieux où la probabilité de trouver cette particule est nulle.

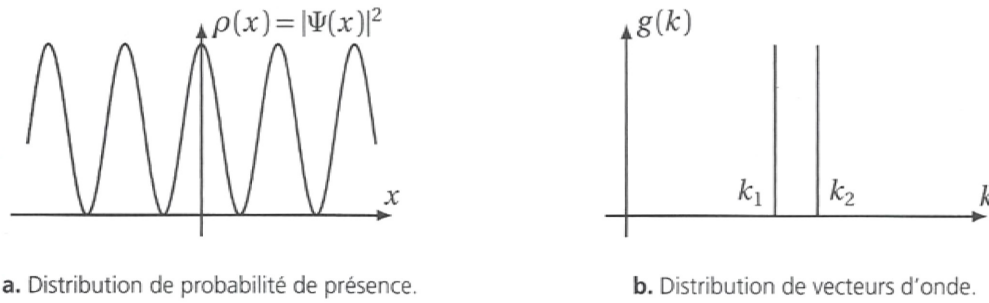


FIGURE 7 – Cas de la superposition de deux OPPM

E.2.3 Paquet d'onde continu

Si on s'intéresse maintenant à un paquet d'onde continu dont le spectre est donné ci-dessous, l'inégalité de HEISENBERG reste qualitativement (et quantitativement) valide. Plus le spectre en fréquence est étalé (Δk grand), plus la particule est localisée (Δx faible).

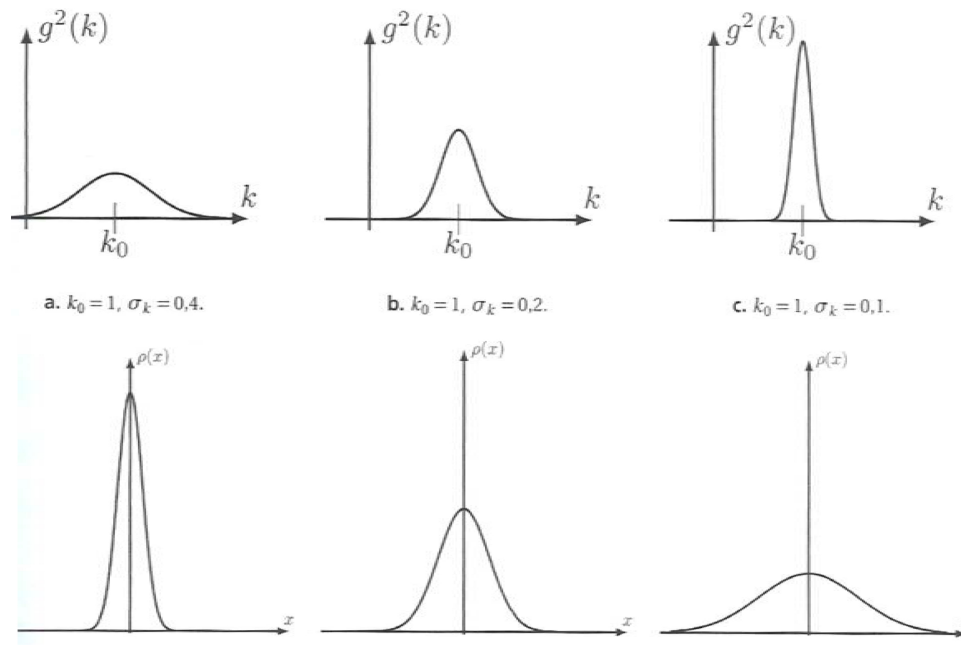


FIGURE 8 – Cas du paquet d'onde gaussien

F. Classique ou Quantique ?

On peut légitimement se demander quand est-ce que les effets quantiques sont à prendre en compte. Deux grandeurs peuvent renseigner sur ce points :

- la longueur d'onde de DE BROGLIE λ_{DB} . Si cette longueur d'onde est négligeable devant les dimensions caractéristiques du système ($\lambda_{DB} \ll \ell$), l'évolution du système est classique.
- on définit aussi un quantum d'action S homogène à une énergie E multipliée par un temps Δt , soit $S = E \cdot \Delta t = p \cdot \ell = \sqrt{E \cdot m} \cdot \ell$. Si ce quantum d'action est du même ordre de grandeur que $\hbar$, le système est quantique.

	Caractéristiques	Quantum d'action S	Longueur d'onde λ_{DB}
Pendule simple ($E \approx mg\ell$)	longueur $\ell = 20$ cm, masse $m = 10$ g	$S \approx 10^{31} \hbar \gg \hbar$	$\lambda_{DB} = 10^{-30} \text{ m} \ll \ell$
Électron dans un atome	énergie $E \approx 1$ eV, longueur $\ell = 10^{-10}$ m, masse $m = 10^{-31}$ kg	$S \approx 0,4 \hbar \sim \hbar$	$\lambda_{DB} = 10^{-9} \text{ m} \sim \ell$

TABLE 3 – Classique ou quantique ?

Pour finir, on peut citer le principe de correspondance de BOHR :

« Dans la situation où classique et quantique doivent concorder, la théorie quantique doit se ramener au résultat classique. »

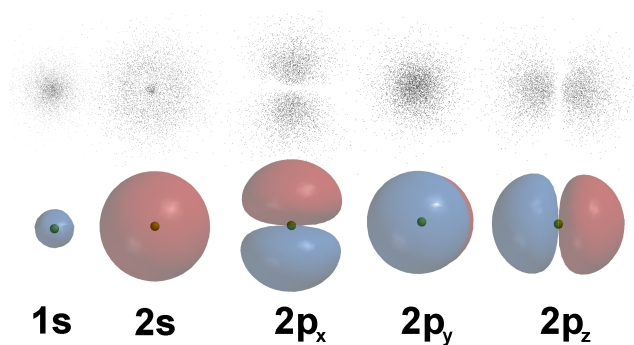


FIGURE 9 – Représentation des nuages de probabilité de présence de l'électron (en haut) et des isosurfaces à 90% (en bas) pour les orbitales 1s, 2s et 2p. Dans le cas des orbitales 2p ($n = 2$, $\ell = 1$), les trois isosurfaces 2p_x, 2p_y et 2p_z représentées correspondent à $m = -1$, $m = 0$ et $m = +1$. Les couleurs indiquent la phase de la fonction d'onde : positive en rouge, négative en bleu