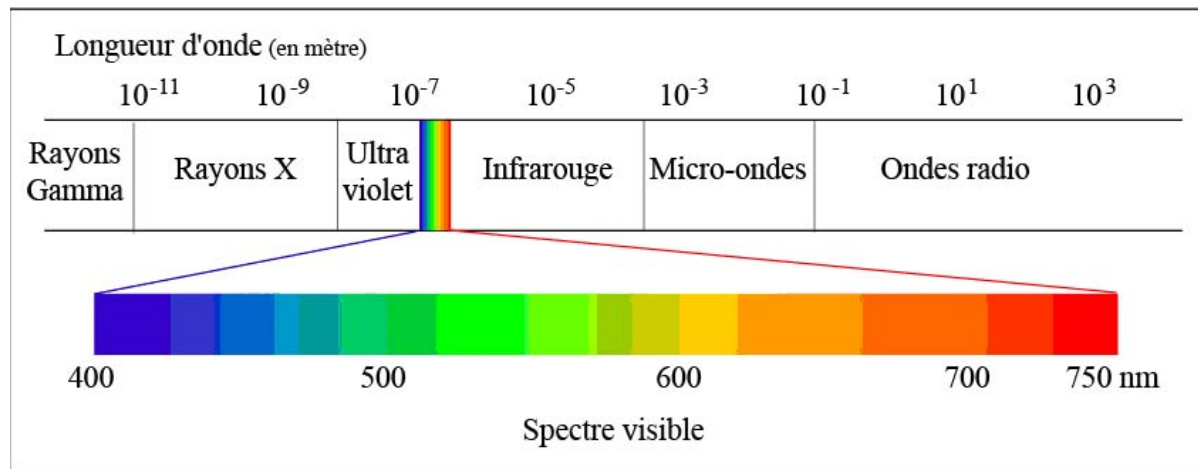




*Université Sidi Mohamed Ben Abdallah*  
*Faculté des Sciences Dhar Mehraz – Fès*  
*Département de Physique*



## Cours de Mécanique Quantique

**Pr. Anouar JORIO**

**SMP-S4**

Année Universitaire 2017-18

**Chapitre 2 :**  
**Les ondes de la matière de**  
**Louis de Broglie**

## I: Les ondes de la matière de Louis De Broglie (1923)

- En 1923, L'historien de la Physique Louis de Broglie généralisa les relations d'Einstein sur les photons ( $E=h\nu$  et  $p=\hbar k$ ) pour toutes les particules matérielle.
- **Postulat de De Broglie:**

A toute particule matérielle de masse  $m$  et de vitesse  $v$ , est associée une onde de longueur d'onde  $\lambda$  définie par la relation:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

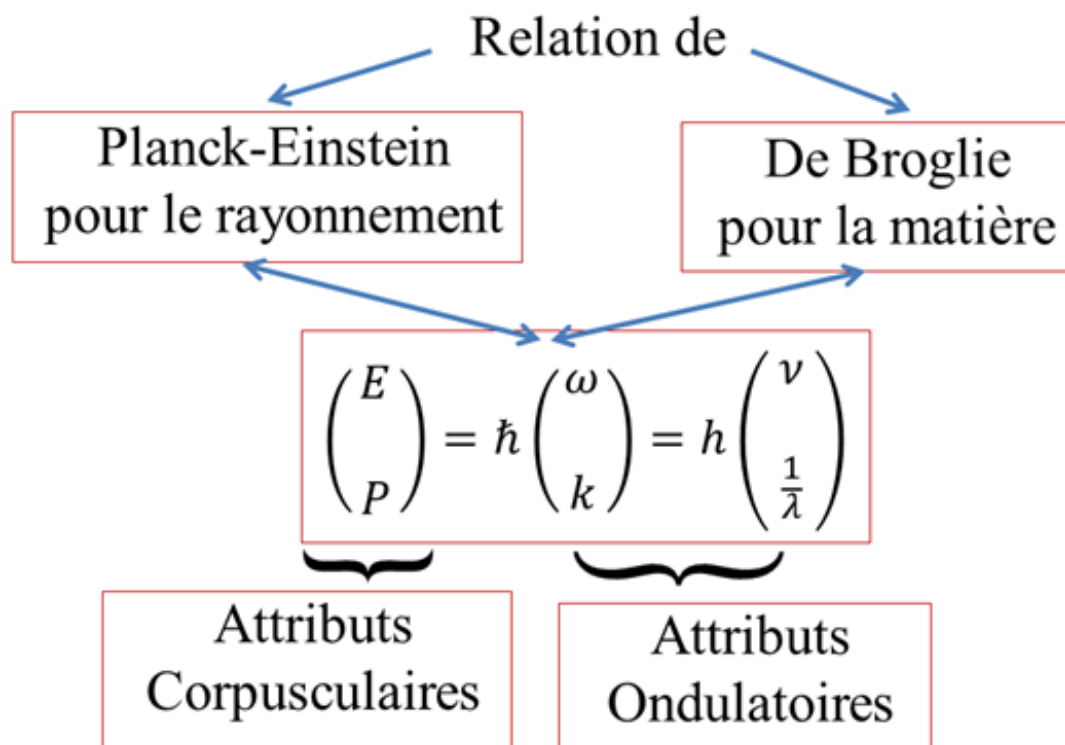
Et d'énergie

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

- Si les dimensions de la particule sont très grands devant  $\lambda$  une étude classique suffit (objet macroscopique).
- Si les dimensions de la particule sont de l'ordre de  $\lambda$  une étude quantique s'impose (objet microscopique).

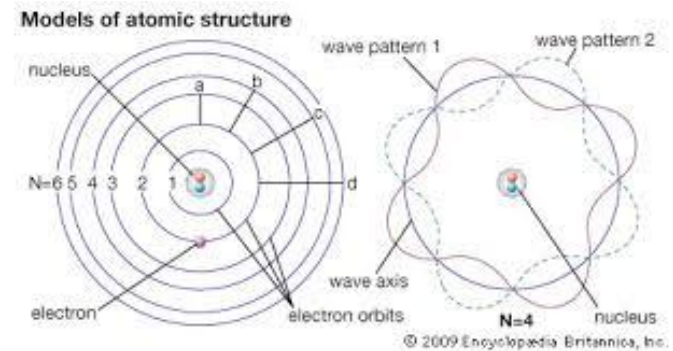
- Ainsi, avec ces relations, Louis De Broglie établissait une généralisation des de la dualité entre les grandeurs ondulatoires et les grandeurs corpusculaires.

## Dualité Onde-Corpuscule Généralisée



## II: Quantification de la matière et la relation de L. De Broglie

■ L. De Broglie considéra l'e<sup>-</sup> comme un corpuscule attaché à une onde de matière « **Onde de matière** » ou « **onde pilotant l'objet** »



- Il associa alors à chaque particule une fonction d'onde  $\psi$  et considéra que la propagation de cette onde se fait autour d'une orbite de rayon  $r$ .
- Le mouvement de l'e<sup>-</sup> sur cette orbite doit être tel que la longueur du trajet effectué par l'onde soit égale à un nombre entier de  $\lambda$ .

Ainsi

$$2\pi r_n = n\lambda$$

D'après la Loi de Louis  
De Broglie

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$



$$mvr_n = n\hbar$$

On retrouve ainsi la règle de quantification de Bohr pour  
l'atome d'hydrogène

### III: Diffraction des électrons

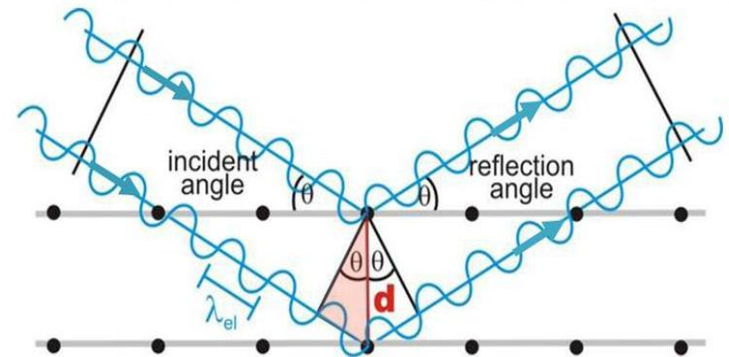
- Expérience de diffraction des électrons réalisée par Davisson et Germer (1927) mettant en évidence l'aspect ondulatoire des électrons.

- Un faisceau d'électrons accélérés par une tension  $U$  sur plaque de Nickel.

- **Constatations expérimentales:**

- Pour  $U$  fixée, l'intensité diffusée montre des maximums importants pour certains angles  $\theta$ .

- Pour  $\theta$  fixée, l'intensité diffusée montre des maximums importants pour certaines valeurs de  $U$



- Les directions privilégiées pour une tension fixée obéissent à la loi de diffraction:

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad \text{avec} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- Or, Energie de ces électrons:

$$E = \frac{1}{2} m_e v^2 = eU \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2eU}{m_e}}$$

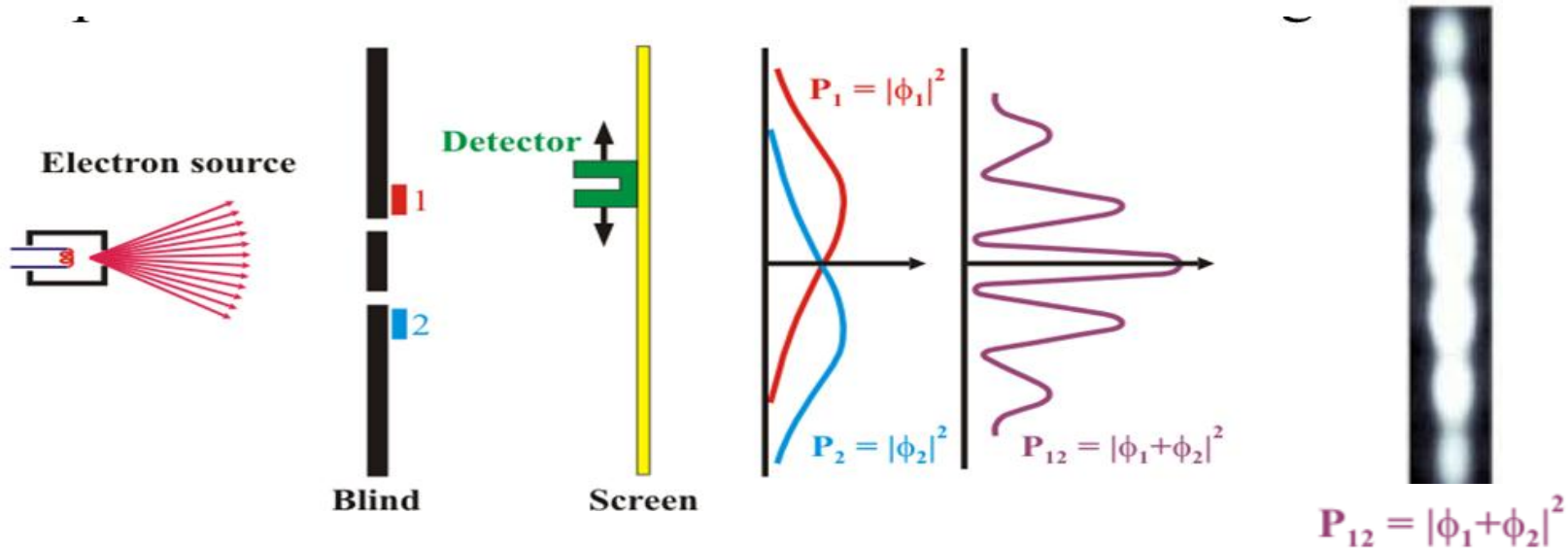
- En utilisant la loi de L. De Broglie, la longueur d'onde associée à chaque électron diffusé est:

$$\lambda = \frac{h}{m_e v} = \frac{h}{\sqrt{2m_e}} \frac{1}{\sqrt{eU}}$$



## IV: Interférences des électrons

- L'interférence des électrons a été prouvée expérimentalement par les fentes de Young.



Les ondes associées aux électrons se comportent comme un faisceau lumineux à la traversée des fentes de Young attestant leur aspect ondulatoire. (*maximas et minima de lumières*)

## Conclusion

- Nous avons vu que le concept de la dualité onde corpuscule est général à l'échelle macroscopique comme à l'échelle microscopique.
- Cependant, à l'échelle macroscopique la longueur de l'onde associée à la matière est très faible devant les dimensions de l'objet. Les effets quantiques sont alors négligeables. Une étude Classique suffit.
- Mais, à l'échelle microscopique (atomique ou subatomique), la longueur d'onde est de l'ordre des dimensions atomiques, les effets quantiques ne sont plus négligeables. Les phénomènes de diffraction et d'interférence sont importants à cette échelle attestant de l'aspect ondulatoire de ces objets.

# **Chapitre 3 :**

## **Equation de Schrödinger et fonction d'onde**

- Nous avons vu que la physique classique considère qu'un objet est un point matériel parfaitement déterminé par une trajectoire dans l'espace des phases.
- En mécanique quantique, la notion du déterminisme n'est plus valable. On ne parle plus de trajectoire, mais d'une probabilité de présence de la particule dans un volume de l'espace.
- Cette probabilité est le module d'une fonction qui va représenter la particule. Cette fonction doit contenir toutes les informations concernant la particule.
- Cette fonction est solution d'une équation plus générale tenant compte des effets quantiques appelée équation de Schrödinger

# I: Notion de fonction d'onde de la matière et son interprétation statistique.

➤ Une onde électromagnétique (photon) est bien représentée par une fonction d'onde de la forme:

$$\psi(\vec{r}, t) = A \exp i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)$$

➤ Cette fonction contient toutes les informations concernant le photon en question. (Energie E, fréquence  $\nu$ , longueur d'onde  $\lambda$ , couleur...)

➤ Avec le concept de dualité, nous pouvons affirmer que l'état d'un système physique est bien décrit par une fonction d'onde  $\psi(r,t)$  .

➤  $\psi(r,t)$  doit contenir toutes les informations concernant l'état du système. Elle dépend du potentiel auquel la particule est soumise.

## Interprétation statistique de la fonction d'onde.

$\psi(\vec{r}, t)$  Représente **une amplitude de probabilité.**

$\psi(\vec{r}, t) = 0$  Pas de particule.

Le carré du module de la fonction d'onde représente **la densité de probabilité de la particule** de présence au point  $r$  à l'instant  $t$ .

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi(\vec{r}, t)\psi^*(\vec{r}, t)$$

A une dimension (Ox par exemple) la fonction d'onde est  $\psi(x, t)$  et la densité de probabilité sera donnée par:

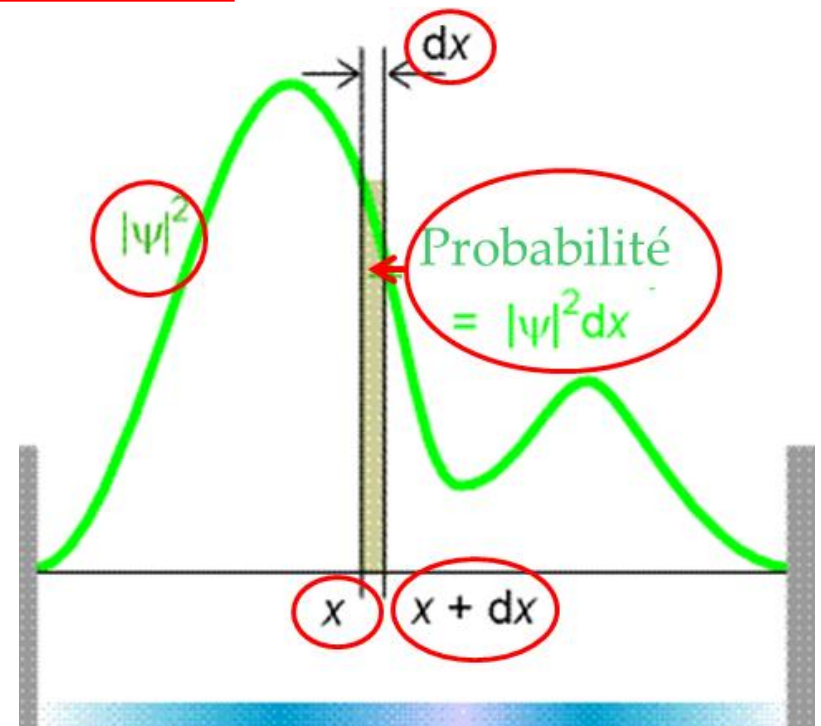
$$|\psi(x, t)|^2 = \psi(x, t)\psi^*(x, t)$$

Dans ces conditions, la probabilité de localiser la particule à l'instant  $t$  dans un élément de volume  $d\tau$  est:

$$d \Pr(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau$$

Ainsi, à une dimension, la probabilité de localiser la particule dans un point compris entre  $x$  et  $x+dx$  à l'instant  $t$  est:

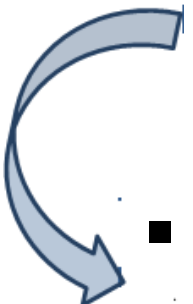
$$d \Pr(x, t) = |\psi(x, t)|^2 dx$$



Donc, à une dimension, la probabilité de trouver la particule à l'instant  $t$  à une position entre  $a$  et  $b$  sera:

$$\Pr(a \leq x \leq b, t) = \int_a^b |\psi(x, t)|^2 dx$$

Comme nous sommes sûr de trouver la particule dans tout l'espace, cette probabilité doit être égale à 1 :


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

Ceci à une dimension

- **C'est la condition de normalisation de  $\psi(x, t)$ .**
- **La fonction d'onde  $\psi(x, t)$  est dite alors normée.**



## II: Conditions sur la fonction d'onde $\psi(x,t)$ .

Il faut que l'intégrale

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx$$

soit convergente

Autrement dit:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx < \infty$$

On dit alors que  $\psi(x,t)$  doit être à **carré sommable** ou encore à **support compact**.

Si  $\psi(x,t)$  n'est pas normée, il faut la normaliser.

## Normalisation de $\psi(x,t)$

$\psi(x,t)$  est une fonction à carré sommable c-à-d

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = I < \infty$$

On peut alors construire  
une fonction d'onde  
normée  $\Phi(x,t)$  tel que

$$\phi(x,t) = N\psi(x,t) \quad \text{ou} \quad N \in \mathbb{C}$$

Ainsi,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x,t)|^2 dx = |N|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = |N|^2 I = 1 \quad \text{soit} \quad |N| = \frac{1}{\sqrt{I}}$$

$$N = \frac{1}{\sqrt{I}} e^{i\theta} \quad \text{ou} \quad \theta = \arg(N)$$

$$\phi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{I}} e^{i\theta} \psi(x,t)$$

est bien normée

$e^{i\theta}$  est un facteur de phase qui ne joue aucun rôle dans les prévisions physiques ( $|e^{i\theta}|=1$ )

Les grandeurs physiques «densités de probabilités» de présence n'en dépendent pas.

$$|\phi(x,t)|^2 = \frac{1}{I} |\psi(x,t)|^2$$

si  $\phi(x,t) = e^{i\theta} \varphi(x,t)$   $\varphi(x,t)$  et  $\phi(x,t)$  représente le même état.

- Une fonction d'onde est toujours déterminée à un facteur de phase près.

- Une détermination réelle de la constante de  $N(\theta=0)$  est suffisante

## II: Equation de Schrödinger dépendante du temps

### A: Formulation de l'équation de Schrödinger:

▪ La fonction d'onde qui décrit toutes les propriétés du système physique doit être déterminée à un instant initial  $t_0$ .

▪ L'équation de Schrödinger décrit l'évolution de la fonction d'onde par rapport au temps et l'espace.

▪ L'évolution temporelle de  $\psi(\vec{r},t)$  a été formulée par Schrödinger sous forme de postulat:

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

$$\text{où } H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r},t) \quad \Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \text{ est le Laplacien}$$

■ H est l'opérateur Hamiltonien du système. Il représente l'énergie totale en M.Q.

$V(\vec{r}, t)$  représente l'énergie potentielle du système physique.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) = \text{Energie totale} = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{r}, t)$$

$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = \frac{P^2}{2m}$  représente l'opérateur correspondant à l'énergie cinétique du système physique.

A une dimension, l'équation de Schrödinger dépendante du temps sera:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H \psi(x, t) \text{ où } H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)$$

## B: Principes vérifiés par l'équation de Schrödinger (E.S.):

### Principe 1: Principe d'évolution

L'état du système  $\psi(x,t)$  à un instant ultérieur  $t$  est parfaitement déterminé par l'action de l'hamiltonien  $H$  sur l'état du système  $\psi(x,t_0)$  à l'instant initial  $t_0$ . ( $t > t_0$ )

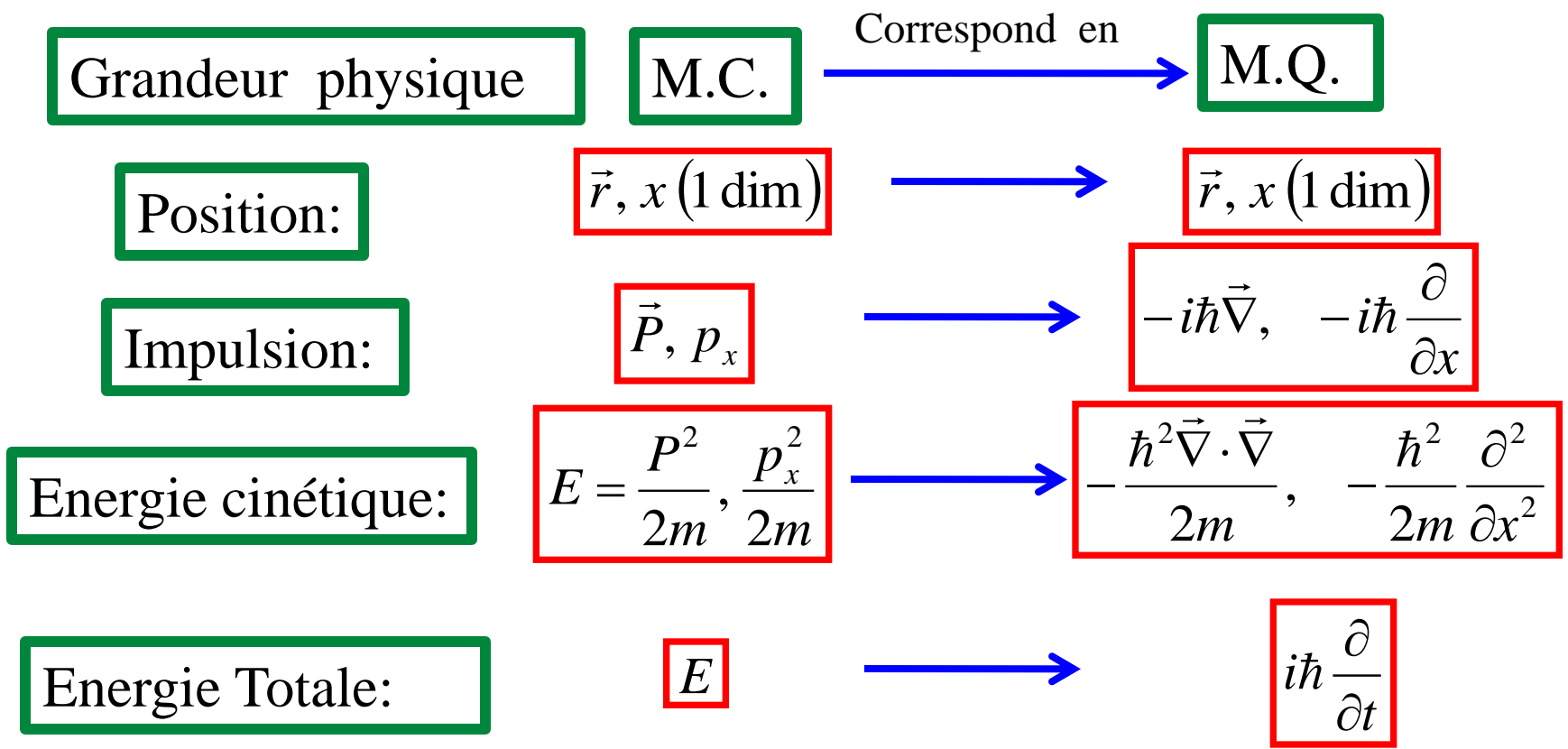
### Principe 2: Principe de superposition

Toute combinaison linéaire de solutions de l'E.S. est aussi une solution.

- ✓ Ainsi, si  $\varphi_1(x,t)$  et  $\varphi_2(x,t)$  sont solutions de l'E.S, alors :
  - $\psi(x,t) = a\varphi_1(x,t) + b\varphi_2(x,t)$  est aussi solution.
  - $a$  et  $b$  sont des scalaires complexes

### Principe 3: Principe de correspondance

A chaque **grandeur physique classique** on fait correspondre **un opérateur** qui agit sur la fonction d'onde. Ainsi,



Ainsi la correspondance entre la mécanique classique et la mécanique quantique se fait via:

En Mécanique Classique, l'énergie totale

$$E = E_C + V(x, t) = \frac{P^2}{2m} + V(x, t)$$

En Mécanique quantique on a l'équation de Schrödinger (E.S.D.T.)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$H\psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x, t)\psi(x, t) = E\psi(x, t)$$



- C'est l'équation de Schrödinger dépendante du temps (E.S.D.T). Sa résolution permet de déterminer l'énergie de la particule ainsi que sa fonction d'onde (autrement dit la probabilité).
- Les propriétés de chaque particule, fixées par son potentiel  $V(x,t)$  ne permettent de retenir que les fonctions d'onde qui seraient physiquement acceptables et compatibles avec le problème étudié.
- Par exemple, si le problème possède une symétrie sphérique, la fonction doit avoir une symétrie sphérique.
- Si la particule ne peut pas se trouver en un point de l'espace, sa probabilité sera nulle et par la suite la fonction d'onde qui la représente sera nulle en ce point. (puits de potentiel)

## C: Description quantique d'une microparticule libre

- Une particule libre est une particule qui n'est soumise à aucune force ( $F=0$ ). Elle est libre à se déplacer dans tout l'espace.
  
- $F=0$  veut dire que le potentiel dont elle dérive est nul.

$$F = 0 = -\nabla V \Rightarrow V = 0$$

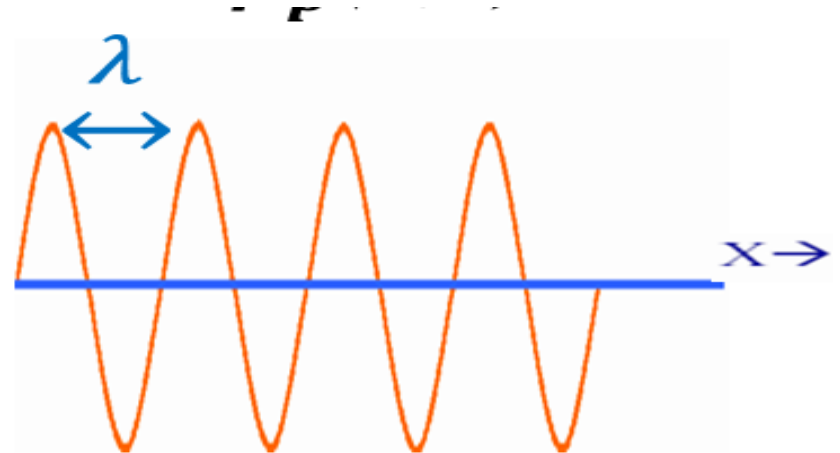
- L'équation de Schrödinger s'écrit alors:

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

- La fonction d'onde solution de cette équation est l'onde plane monochromatique donnée par :

$$\psi(x, t) = Ae^{-i(\omega t - kx)} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - Px)} \text{ ou encore } \psi(x, t) = \psi_0 \cos(\omega t - kx)$$

- $\psi$ : l'élongation d'un point  $x$  au temps  $t$ .
- $\psi_0$ : l'élongation maximale.
- $\omega$ : pulsation de l'onde



- Mais cette solution n'est pas physiquement acceptable. En effet, cette fonction n'est pas à carré sommable.

- La densité de probabilité présence est donnée par:

$$|\psi(x, t)|^2 = |A|^2$$

- La probabilité présence est donnée par:

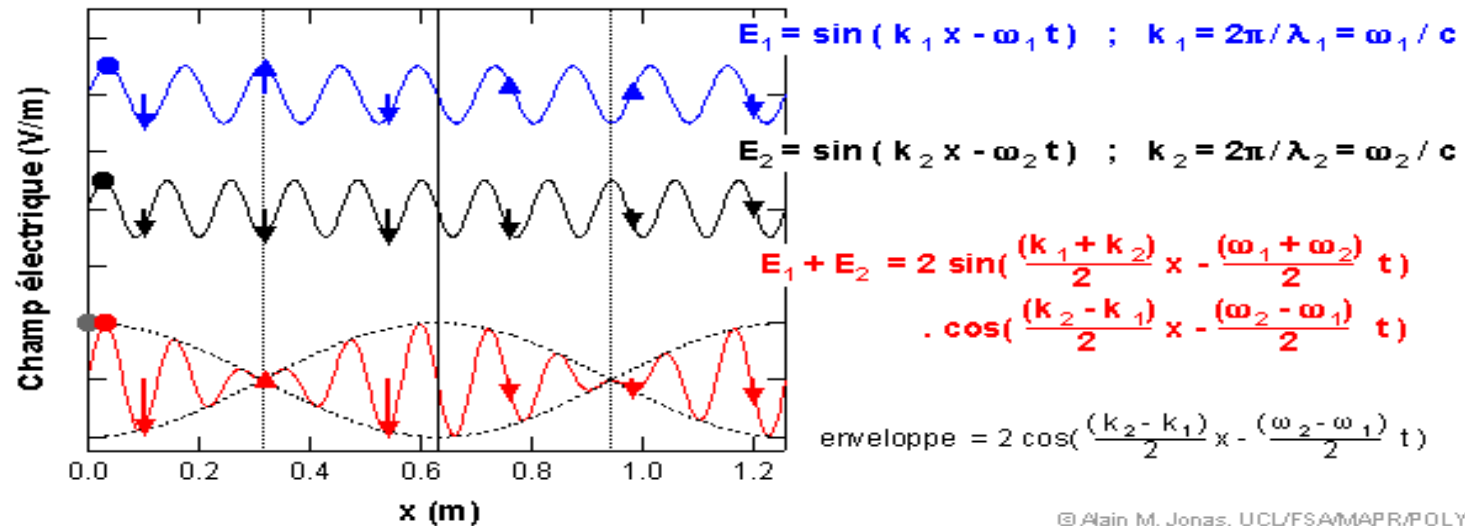
$$\text{Pr} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 dx \rightarrow \infty$$

- Donc, l'onde plane monochromatique ne peut pas représenter une particule libre. Car, physiquement, il n'existe pas de particule libre. Elle est toujours perturbée par d'autres potentiels.

- Nous supposerons alors, pour tenir compte de ces potentiels perturbateurs que la fonction d'onde de la particule libre sera une superposition de ces ondes planes monochromatiques de fréquences très voisines toutes solutions de l'E.S.D.T.
- Ceci est en accord avec le principe de de superposition.
- Cette **superposition** d'onde plane monochromatique va générer **le phénomène d'interférence** caractérisé par des maximas et des minimas d'intensité.

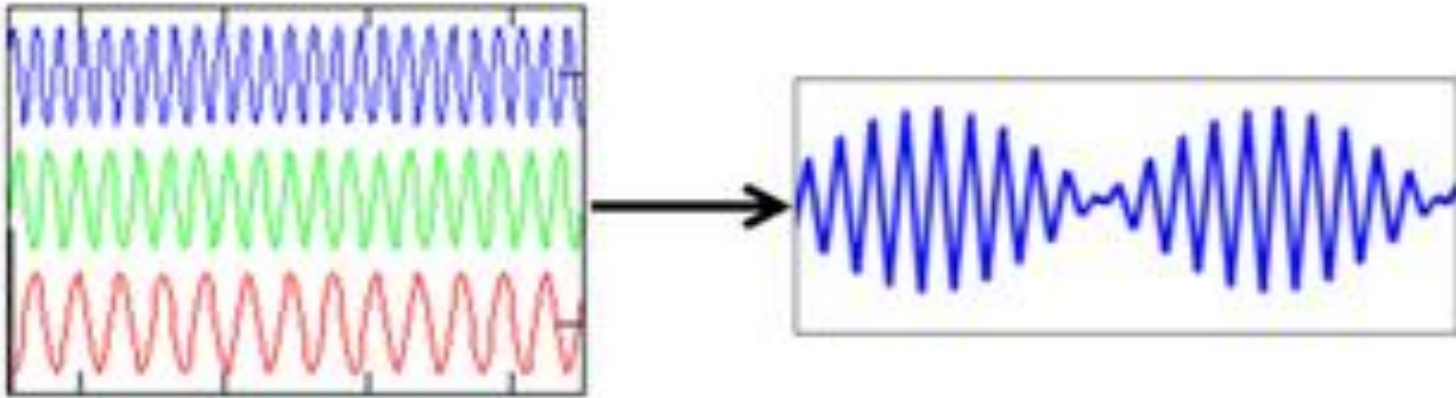
# Exemple de superposition

## Superposition de 2 O.P.M.



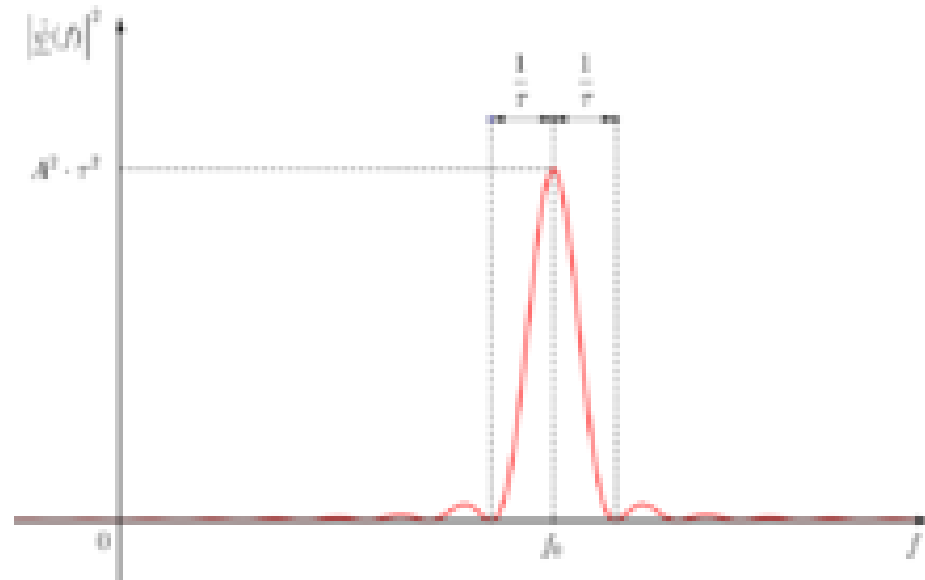
- L'intensité de l'onde résultante (enveloppe) présente des maxima et des minima comme le phénomène d'interférence pour 2 trous de Young.

## Superposition de 3 O.P.M.



## Superposition de plusieurs O.P.M.

- L'intensité de l'onde résultante présente un maximum central dû aux interférences constructives



## Définition d'un paquet d'onde

- Nous concluons qu'une particule libre ne peut pas être représentée par une onde plane monochromatique (O.P.M.), mais plutôt par une superposition d'O.P.M.. C'est le paquet d'onde.
- Un paquet d'onde  $\psi(x,t)$  est une superposition d'une infinité d'O.P.M de toutes les longueurs d'ondes  $\lambda$  possibles.

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(k,t) e^{-i(\omega t - kx)} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p,t) e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - Px)} dp$$

- $\varphi(k,t)$  ( $\varphi(p,t)$ ) est la transformée de Fourier de  $\psi(x,t)$ .  $\varphi(k,t)$  définit l'amplitude spectrale de la fonction d'onde de la particule

$$\varphi(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,t) e^{+i(\omega t - kx)} dx \quad \text{et} \quad \varphi(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,t) e^{+\frac{i}{\hbar}(Et - Px)} dp$$



- on peut exprimer le paquet d'onde sous la forme:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p,t) e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-Px)} dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(p,t) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp$$

- Avec  $\bar{\psi}(p,t) = \varphi(p,t) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$  **La transformée de Fourier (T.F.) de la fonction d'onde  $\psi(x,t)$**

- Dans ces conditions,  $\psi(x,t)$  est la transformée de Fourier inverse (T.F.)<sup>-1</sup> de  $\bar{\psi}(p,t)$

$\bar{\psi}(p,t)$  est définie par:

$$\bar{\psi}(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,t) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx$$

**La (T.F.) obéit à l'égalité de Parseval-Plancherel**

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\bar{\psi}(p,t)|^2 dp$$

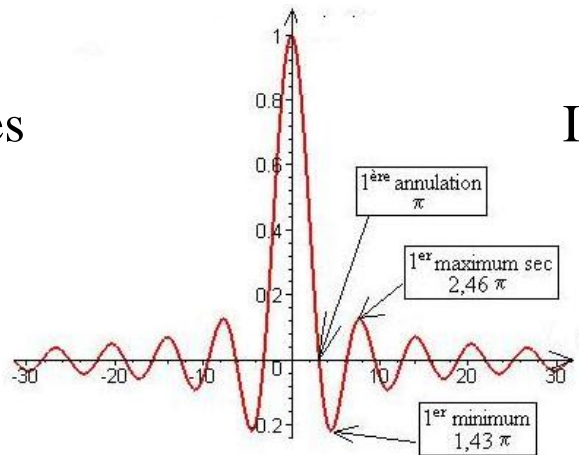
- D'après cette relation, si  $\psi(x,t)$  est normée, automatiquement  $\overline{\Psi}(p,t)$  est normée.

▪ La construction d'un paquet d'onde libre consiste en la superposition de plusieurs ondes monochromatiques. A cette superposition résultera des interférences constructives et destructives.

Interférences constructives



Maximum de lumière

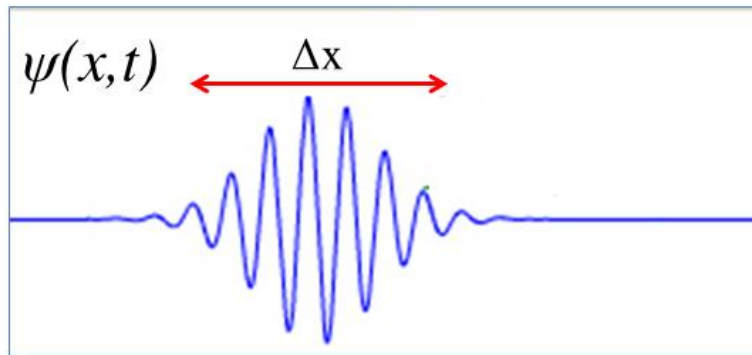


Interférences destructives



Minimum de lumière

▪ Ainsi a cette superposition d'onde plane monochromatique résultera une partie de l'espace **de largeur  $\Delta x$**  où l'intensité du P.O.  $\psi(x,t)$  est maximale due aux interférences constructives.

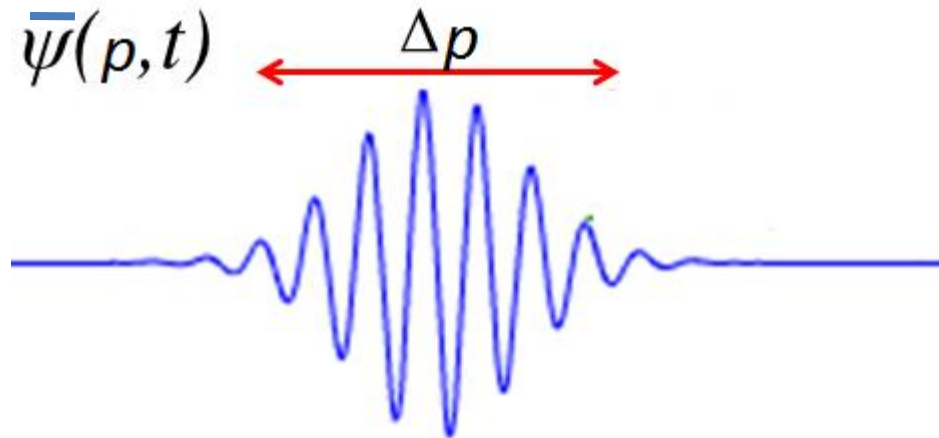


▪ En dehors de cette largeur  $\Delta x$ ,  $\psi(x,t)$  est presque nulle en accord avec les interférences destructives.

▪ Autrement dit que le P.O.  $\psi(x,t)$  ne prend **de valeurs appréciables** que sur une région localisée de l'espace **de largeur  $\Delta x$** .  $\psi(x,t)$  est dite alors **une fonction à support compact** qui décrit bien la particule libre.

■ En utilisant l'égalité de Parseval Plancherel , et en raisonnant sur la transformée de Fourier  $\bar{\Psi}(p,t)$  nous concluons que:

$\bar{\Psi}(p,t)$  ne prend de valeurs appréciables que sur une région localisée de l'espace **de largeur  $\Delta p$** .



$\bar{\Psi}(p,t)$  est une fonction à support compact dans l'espace des  $p$

## D: Vitesse de Phase et vitesse de groupe.

### 1- Vitesse de phase: $V_{\varphi}$ .

**Définition:** C'est la vitesse de propagation des plan d'égale phase.

Soit un paquet d'onde caractérisé par le nombre d'onde  $k$  et par sa pulsation  $\omega$ .

À la position  $x_1$  et au temps  $t_1$  la phase de l'onde est  $\omega t_1 - kx_1$

À la position  $x_2$  et au temps  $t_2$  la phase de l'onde est  $\omega t_2 - kx_2$

Plan d'égale phase  $\longrightarrow \omega t_1 - kx_1 = \omega t_2 - kx_2$

$$v_{\varphi} = \frac{x_2 - x_1}{t_2 - t_1} = \frac{\omega}{k}$$

## 2- Vitesse de phase: $V_g$ .

**Définition:** C'est la vitesse de propagation du maximum central du paquet d'onde dû aux interférences constructives. Elle est définie par la relation:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$$

C'est aussi la vitesse de propagation de l'énergie dans le solide.

Cas d'une particule libre:

$$E = \frac{P^2}{2m} \Rightarrow v_g = \frac{P}{m} = V$$

La vitesse de groupe  $v_g$  coïncide avec la vitesse de la particule  $v$  (T.D.)

Les deux vitesses  $v_g$  et  $v_\phi$  sont liées par la relation  $v_g v_\phi = c^2$  (T.D.)

## E: Principe d'Incertitude d'Heisenberg (P.I.H). (1927)

- Nous avons vu qu'un paquet d'onde  $\psi(x,t)$  ne possède de valeurs appréciables que sur une région de l'espace de largeur  $\Delta x$  où la particule est localisée.
- Or, chaque onde plane est caractérisée par son impulsion  $p$
- Dans l'espace des impulsion, caractérisé par la transformée de Fourier  $\overline{\psi}(p,t)$  ne possède des valeurs appréciables que dans une région de l'espace de largeur  $\Delta p$ .

Pour un paquet d'onde

Si  $p$  est connue avec précision:

-  $\Delta p$  est faible ( $\neq 0$ )

- alors la position est indéfinie  $\Delta x = \infty$

Par contre si:

-  $\Delta x$  est faible ( $\neq 0$ )

- alors l'impulsion est indéfinie  $\Delta p = \infty$

➤ Le P.I.H. est un principe d'indéterminisme qui dit qu'il est impossible de connaître simultanément la position  $x$  et l'impulsion  $p$  d'une particule quantique.

➤ D'où, la relation d'incertitude d'Heisenberg.

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1)$$

$\Delta x$  est l'incertitude sur la mesure de la position.

$\Delta p$  est l'incertitude sur la mesure de l'impulsion.



Dans cette relation  $x$  et  $p$  jouent des rôles symétriques, on les appelle variables conjuguées.

En mécanique quantique, les variables énergie  $E$  et temps  $t$  sont aussi des variables conjuguées, la R.I.H. s'écrit alors:

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

C-à-d qu'on ne peut pas mesurer en même temps l'énergie et le temps de vie de la particule.

La relation (1) correspond la R.I.H. position-impulsion.  
La relation (2) correspond la R.I.H. temps-énergie

**Conséquence:** Considérons une particule au repos et mesurons sa position  $x$  avec une incertitude  $\Delta x$ .

A partir de la R.I.H.  $\longrightarrow$   $\Delta p \geq \frac{\hbar}{\Delta x}$

C-à-d la mesure avec exactitude la position fait perdre toutes les informations sur l'impulsion et inversement.

Autrement dit, en Mécanique Quantique:

**Mesurer = perturber**

# Conséquences de ceci

- La notion de la trajectoire perd son sens en M.Q.
- Elle est remplacée par la fonction d'onde et par la suite d'une probabilité de présence qui décrit l'état quantique de la particule.
- L'état quantique, perturbé par la simple mesure des grandeurs associées au système est aussi de nature probabiliste.