

# Chapitre II

$\hbar$

## *Dualité Onde - corpuscule*

$\hbar$

# Sommaire

$\hbar$

## Dualité onde-corpuscule :

- Cas de la lumière;

- Cas de la matière,

  - Fonction d'onde d'une particule matérielle;

  - Equation d'onde pour les particules

## Le paquet d'ondes

## Vitesse de phase et vitesse de groupe

- Vitesse de phase;

- Vitesse de groupe

## Relations d'incertitude de Heisenberg

$\hbar$

# La lumière : Aspect onde-corporelle

 $\hbar$ 

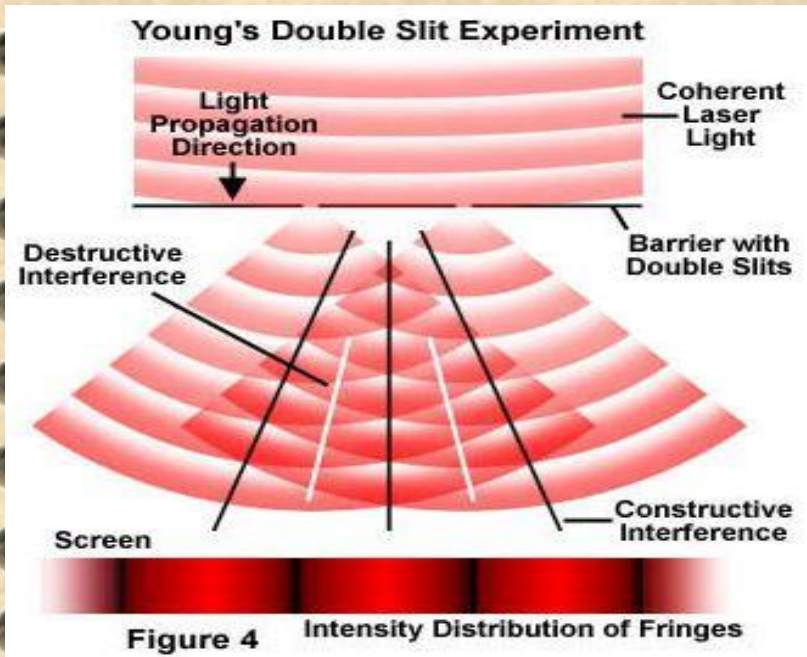
*Ondulatoire*



*corporelle*

phénomènes de propagation de diffraction et d'interférences

Expliqué par Planck & Einstein



La lumière se propage sous forme des quanta



forme des grains

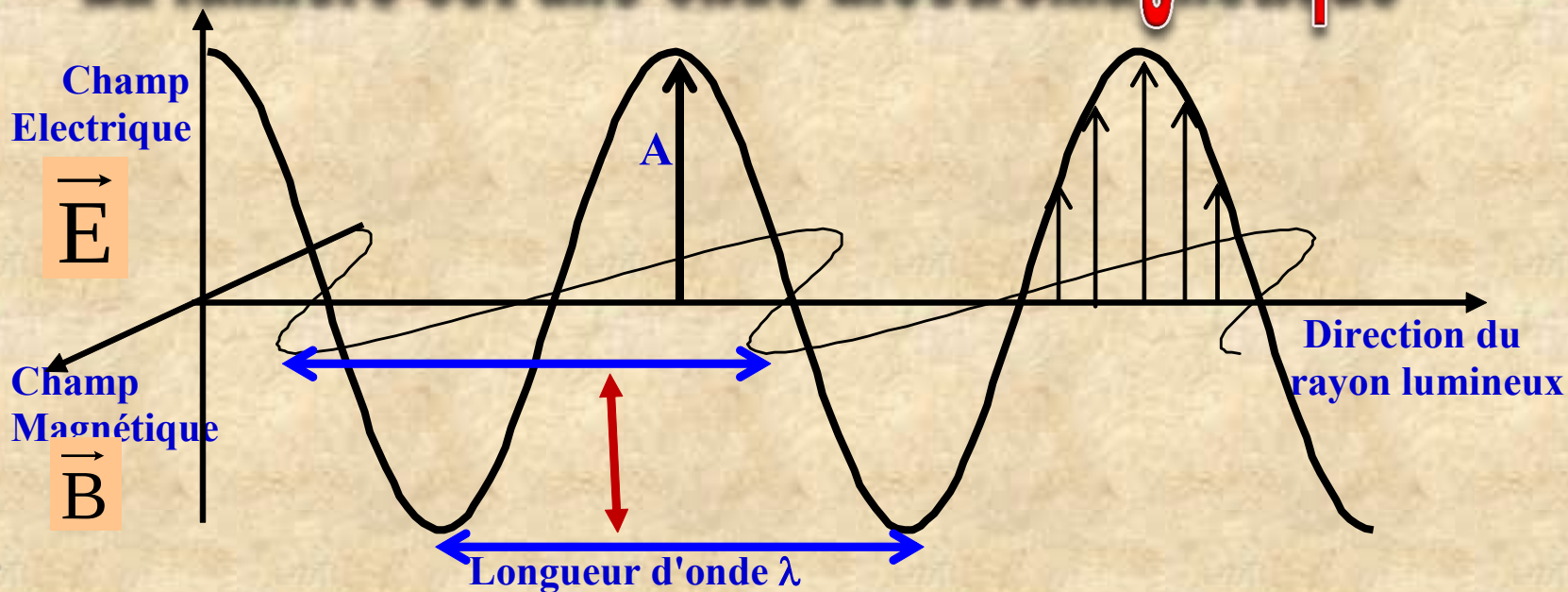
CONFIRMÉ PAR COMPTON

Young

 $\hbar$

# La lumière est une onde Electromagnétique

$\hbar$



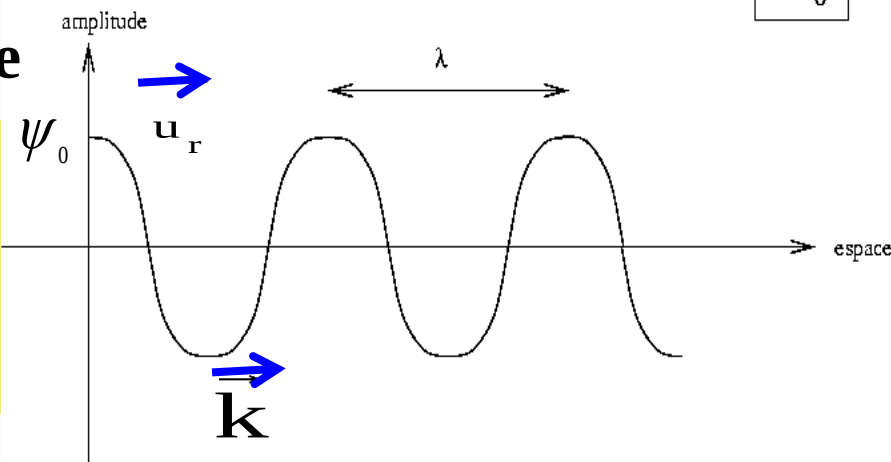
L'onde est décrite par une fonction  $\Psi(\vec{r}, t)$  qui sont des variables d'espace et de temps.

Satisfait à une EDDP 2 ordre

$t = t_0$

$$\Delta \Psi(\vec{r}, t) - \frac{1}{V^2} \frac{\partial^2 \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = 0$$

Equation de propagation



$\hbar$

# La Solution de l'équation de propagation

$\hbar$

Fonction d'onde      Position      Temps

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

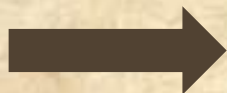
Amplitude      Vecteur d'onde      Pulsation

Longueur d'onde (m) :  $\lambda = 2\pi / \|\vec{k}\|$       Fréquence (Hz) :  $\nu = \omega / 2\pi$

Vitesse de propagation (m/s) :  $V = \omega / \|\vec{k}\| = \lambda \nu$

Ondes électromagnétiques (solutions des équations de Maxwell)

$\vec{OX}$



$$\Psi(x, t) = \Psi_0 e^{i(k \cdot x - \omega t)}$$

## Unification quantique des deux aspects & conclusion

On admettra alors l'hypothèse de Max Born (1924) selon laquelle :

$\vec{\psi}(\vec{r}, t)$  est la fonction d'onde du photon, elle caractérise entièrement son état à l'instant  $t$  et représente "l'amplitude de probabilité" de trouver le photon au point  $\vec{r}$  à l'instant  $t$ .

$\|\vec{\psi}(\vec{r}, t)\|^2$  est la densité de probabilité de trouver le photon au point  $\vec{r}$  à l'instant  $t$ .

Les prévisions sur le comportement d'un photon ne peuvent être que de type probabiliste.

Toute mesure perturbe le système de façon fondamentale. Il est impossible d'observer à la fois les franges et de savoir par quelle fente est passé le photon !



# Est-ce que la matière a un aspect ondulatoire? $\hbar$

Prince Louis De Broglie (1892-1987) Prix Nobel 1929

De Broglie a généralisé la notion de dualité Onde-Corpuscule à la matière

La matière comme la lumière doit posséder la double entité corpusculaire et ondulatoire : les relations d'Einstein valables pour le photon doivent l'être également pour la particule.

**Corpuscule**

**Onde**

Variables dynamiques  
des corpuscules

grandeurs caractéristiques de  
l'onde de matière associée

$E$  &  $\vec{p}$

$\omega$  &  $\vec{k}$

**Energie et impulsion**

**Fréquences et vecteur d'onde**

**Matière**

**Longueur d'onde**

$\hbar$

Toutes les particules possèdent aussi une nature ondulatoire et vice versa toutes les ondes possèdent aussi un caractère corpusculaire!!!

$$\left. \begin{array}{l} E = h\nu = \frac{h}{2\pi} \omega = \hbar\omega \\ \vec{P} = \hbar\vec{k} \end{array} \right\} \rightarrow |\vec{k}| = k = \frac{2\pi}{\lambda} \text{ et } |\vec{P}| = \hbar|\vec{k}| = \frac{h}{\lambda} \quad \text{avec } \omega = 2\pi\nu$$

(Limite non-relativiste  $v \ll c$ )

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{mv}} \text{ Loi de Louis de Broglie}$$

$\lambda$  : longueur d'onde

$h$  : constante de Planck

$mv$  : quantité de mouvement

m: masse de la particule et v sa vitesse

La nature ondulatoire est caractérisée par la longueur d'onde de de Broglie  $\lambda$ :

$\lambda$  diminue si m , V augmente ou E augmente

**Lorsque la particule se déplace à une vitesse  $V$  voisine de celle de la lumière :**

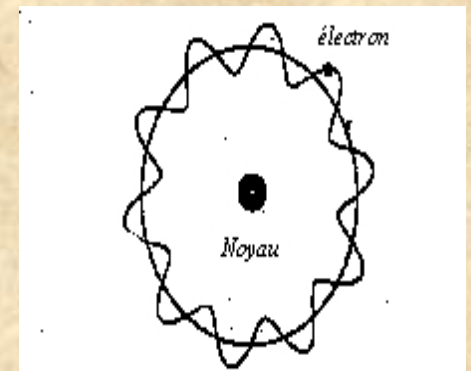
$$\lambda = \frac{h}{mc} \frac{\sqrt{1 - \frac{V^2}{C^2}}}{\frac{V}{C}}$$

Avec la relation de De Broglie on comprend mieux la signification de la condition de quantification de Bohr rencontrée dans le **chapitre I**. En effet, dans le cas d'une orbite électronique circulaire, la circulation de  $\vec{p}$  est:

$$\int \vec{p} \cdot d\vec{l} = p 2\pi r = \frac{h}{\lambda} 2\pi r = nh$$

$$2\pi r = n\lambda$$

Cette relation exprime simplement l'établissement d'un système d'ondes stationnaires sur l'orbite comme c'est le cas pour une corde vibrante.



# Ondes de De Broglie

Les aspects ondulatoires des particules n'apparaissent pas dans la physique macroscopiques (longueurs d'onde beaucoup trop petites)

## Grain de sable

  $m = 10 \mu\text{g}$  ,  $v = 1 \text{ cm/s} \rightarrow \lambda = 6.6 * 10^{-24} \text{ m}$

## Etre humain

  $m = 70 \text{ kg}$  ,  $v = 5 \text{ km/h} \rightarrow \lambda = 6.8 * 10^{-36} \text{ m}$

## Electron

  $m = 9,1 * 10^{-31} \text{ kg}$  ,  $E_C = 1 \text{ eV} \rightarrow \lambda = 1 \text{ nm}$

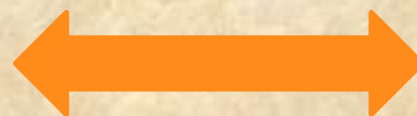
Ordre de grandeur des distances interatomiques

# Mise en évidence expérimentale de l'onde de De Broglie

$$\lambda \approx d$$

Pour un électron de quantité de mouvement  $\mathbf{p}$  et donc d'énergie cinétique  $E_C = \mathbf{p}^2/2m$ , la longueur d'onde associée  $\lambda$  est :

$$E_C = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} \frac{h^2}{\lambda^2}$$



$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_C}}$$

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2me.V}}$$

$$\lambda(\text{\AA}) = \sqrt{\frac{150}{E_C(\text{eV})}} \approx \frac{12.26}{\sqrt{V(\text{Volt})}}$$

Si on considère que l'électron sort avec l'énergie thermique  $E_C = \frac{1}{2}k_B T$  par degré de liberté. On peut écrire :

$$E_C = \frac{1}{2}mV^2 = \frac{3}{2}k_B T \quad \text{d'où} \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}}$$

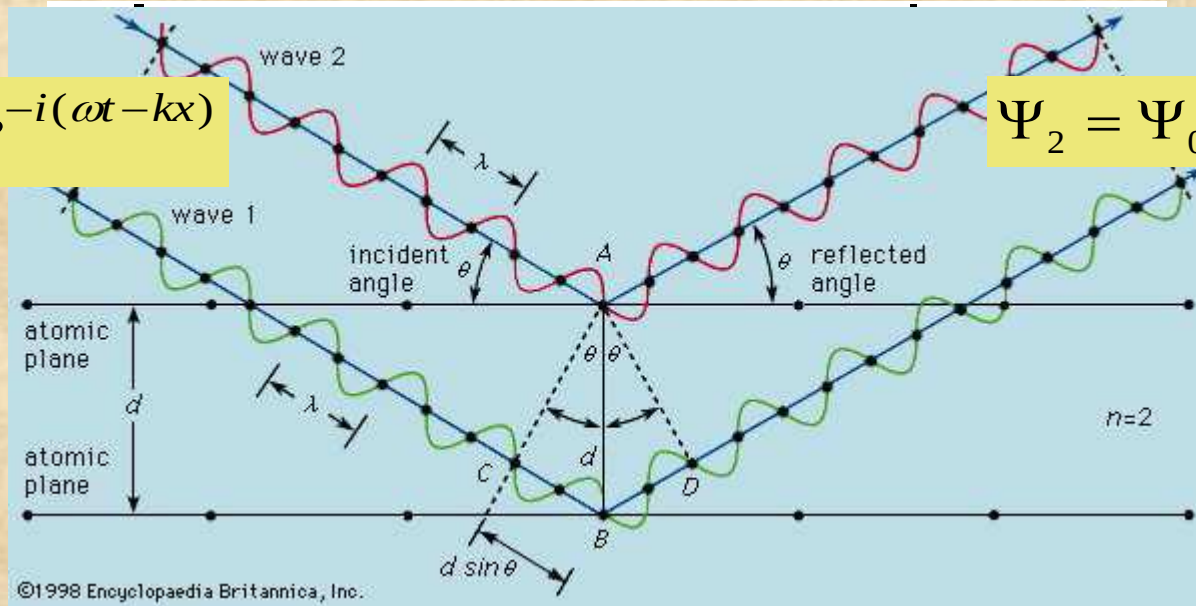
La longueur d'onde sera d'autant plus grande que la température est petite.

# Clinton Joseph Davisson et Lester Halbert Germer (1927)

$\hbar$

$$\Psi_1 = \Psi_0 e^{-i(\omega t - kx)}$$

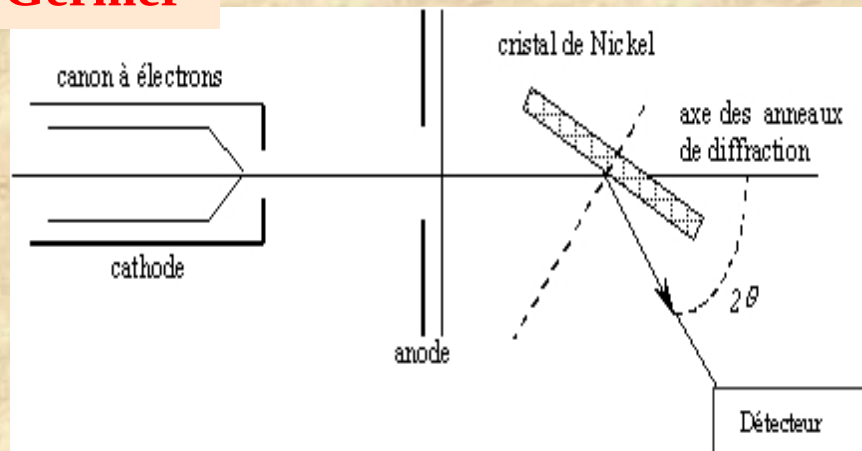
$$\Psi_2 = \Psi_0 e^{-i(\omega t - kx - 2kd \sin \theta)}$$



J

## Davisson et Germer

$$2d \sin \theta_n = n\lambda$$



La matière c'est comme la lumière a une dualité Onde corpusculaire

$\hbar$

onde électromagnétique ou de matière

onde incidente

ondes diffusées

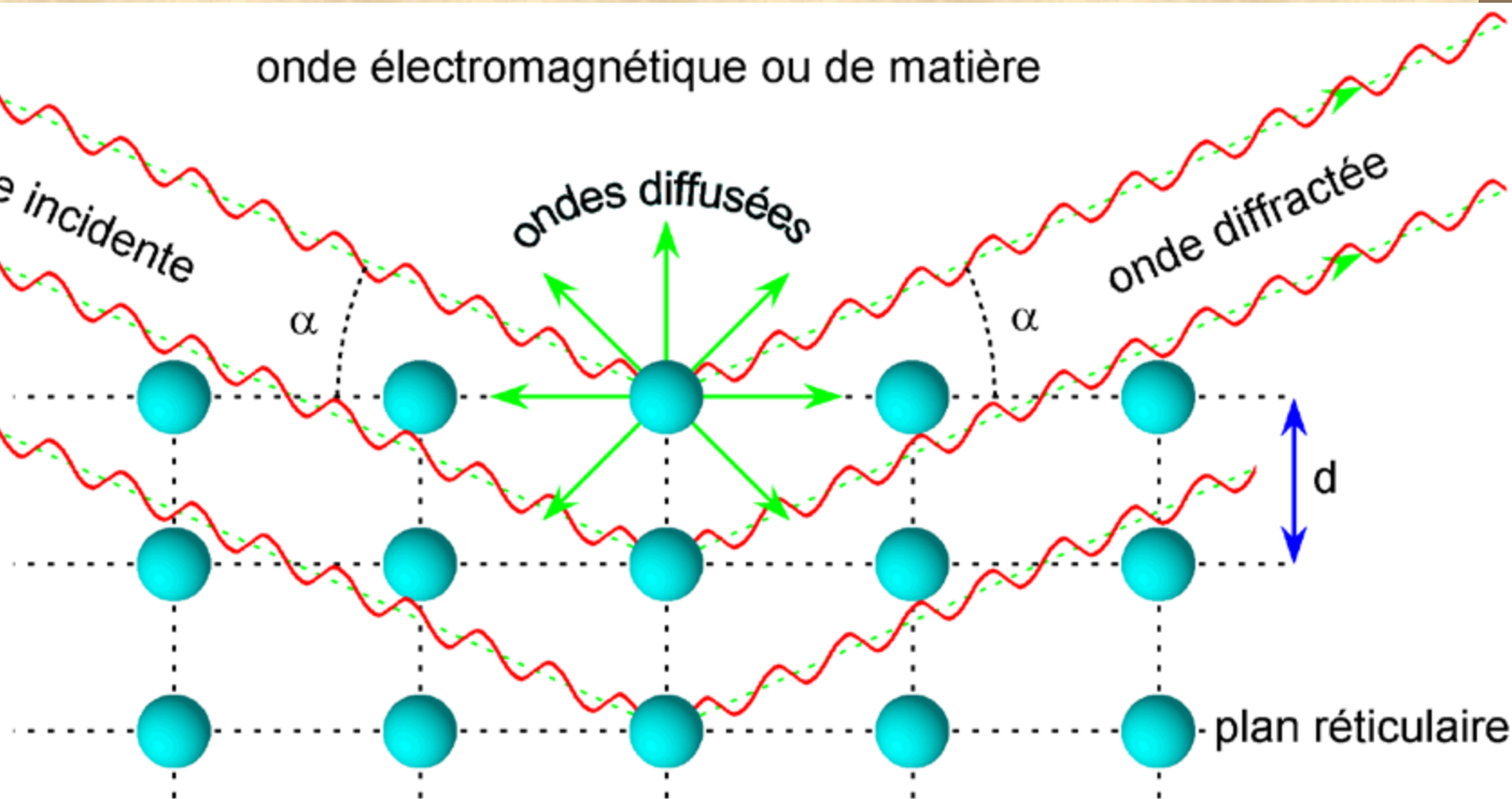
onde diffractée

$\alpha$

$\alpha$

$d$

plan réticulaire



# Fonction d'onde et distribution de probabilité d'une particule matérielle

$\hbar$

Comme pour le photon, nous caractériserons l'état d'une particule matérielle à l'instant  $t$  par la donnée d'une fonction d'onde  $\Psi(\vec{r}, t)$  qui contient toutes les informations sur la particule.  $\Psi(\vec{r}, t)$  est en général une fonction complexe.

$$(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C}$$

$$(\vec{r}, t) \rightarrow \Psi(\vec{r}, t)$$

$\Psi(\vec{r}, t)$  est interprétée comme une amplitude de probabilité de présence de la particule au point  $\vec{r}$  à l'instant  $t$ .

$|\Psi(\vec{r})|^2 = \Psi(\vec{r}) \times \Psi^*(\vec{r})$  est la densité de probabilité de présence de la particule.

Avec  $\Psi^*$  conjugué complexe de  $\Psi$

La probabilité de trouver la particule à l'instant  $t$  dans l'élément de volume  $d^3r = dx dy dz$ .

$$dP = |\Psi(\vec{r})|^2 d^3r$$

L'état physique d'un **quanton** est entièrement défini par une **fonction d'onde scalaire complexe**, notée  $\Psi(r,t)$ , continue des variables spatiales et temporelle, qui représente une **amplitude de probabilité d'état**.

## Probabilité de présence

$$dP(M) = |\Psi(r,t)|^2.d\tau$$

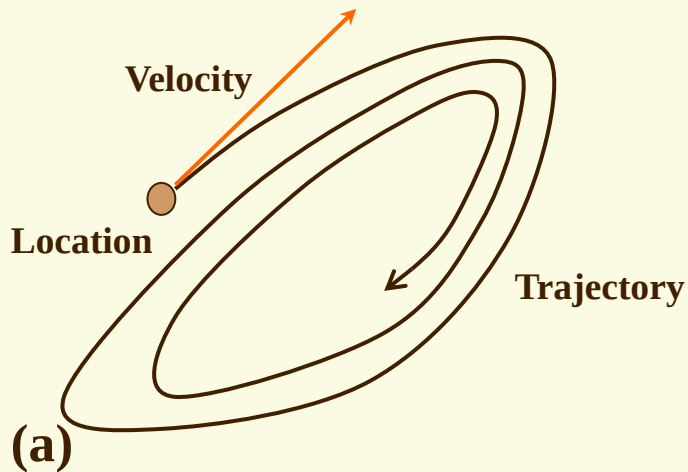
$$dP(M) = \Psi(r,t).\Psi^*(r,t).d\tau$$

## Normalisation de $\Psi$

$$\int_{\text{espace}} dP(M) = \int_{\text{espace}} |\Psi(\mathbf{r},t)|^2 .d\tau = \int_{\text{espace}} \rho(\mathbf{r},t).d\tau$$

$$\int_{\text{espace}} dP(M) = 1$$

# Fonction d'onde et la distribution de probabilité d'une particule matérielle $\hbar$

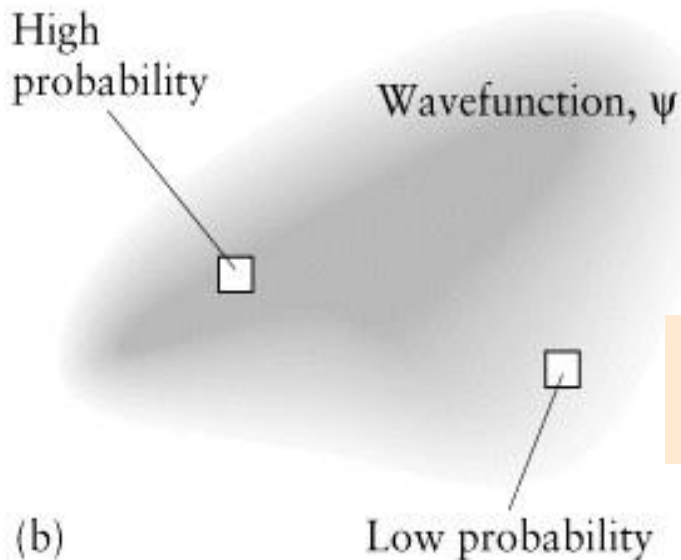


## Mécanique classique:

La position et la vitesse d'une particule sont exactement définis à chaque instant du temps.

## Mécanique quantique:

La particule est mieux décrite par son caractère ondulatoire avec une fonction d'onde  $\Psi(r,t)$ .



Le carré de la fonction d'onde est une mesure pour la probabilité  $P(r)$  que la particule est présente dans un élément de volume  $dV$  infiniment petit autour de  $r$ .

$$P(\vec{r}) = \Psi^2(\vec{r})dV$$

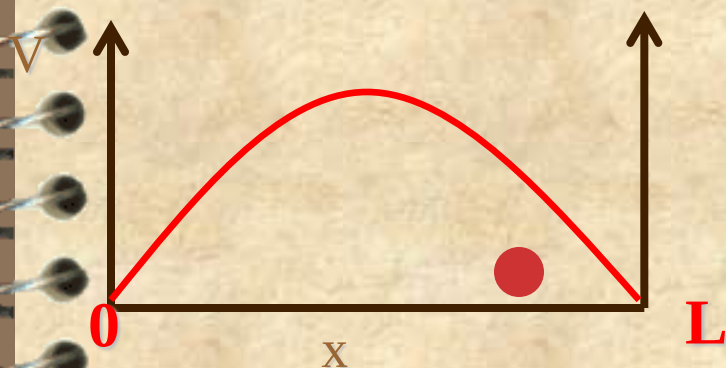
La probabilité totale de trouver la particule n'importe où dans l'espace est égal à 1.

$$\int \Psi^2(\vec{r})dV = 1$$

La mécanique quantique n'est pas déterministe

# Un exemple d'une fonction d'onde

- Particule dans une boîte:



La fonction d'onde pour l'état le plus bas est:

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\pi \frac{x}{L}\right)$$

La probabilité  $P(x)$  de trouver la particule à une certaine position  $x$ :

$$P(x) = \psi_1^2(x) = \frac{2}{L} \sin^2\left(\pi \frac{x}{L}\right)$$

$$P(x=0) = P(x=L) = 0$$

Quelle est la probabilité maximale  $P^{\max}(x)$  ?:

$$\frac{dP(x)}{dx} = \frac{2}{L} \frac{d}{dx} \left[ \sin^2\left(\pi \frac{x}{L}\right) \right] = 0$$

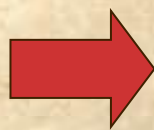


$$\frac{4}{L} \sin\left(\pi \frac{x}{L}\right) \cos\left(\pi \frac{x}{L}\right) \frac{\pi}{L} = 0$$

## Un exemple d'une fonction d'onde

$$\frac{4\pi}{L^2} \sin\left(\pi \frac{x}{L}\right) \cos\left(\pi \frac{x}{L}\right) = 0 \implies \sin\left(2\pi \frac{x}{L}\right) = 0 \implies \left(\pi \frac{x}{L}\right) = \pi / 2$$

$$\sin(a) \cos(b) = (1/2)(\sin(a + b) + \sin(a - b))$$



**$P^{\max}$  est à  $x = L/2$**

La probabilité la plus grande de trouver la particule est au milieu de la boîte!

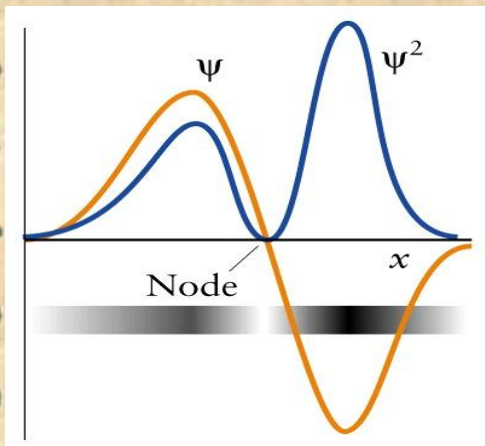
**Remarque: dans le cas classique la probabilité est la même pour tous les  $x$ !  $P(x)$  est constante!!**

# Espérance et écart type

## Mécanique quantique:

La position d'une particule n'a plus une seule valeur bien définie mais on peut trouver la particule avec certaine probabilité dans des régions différentes de l'espace. La position de particule est décrite par une distribution de probabilité. La position plus probable est la moyenne de la distribution (espérance en anglais 'expectation value').

L'espérance de la position  $\langle \vec{r} \rangle$  d'un électron décrit par la fonction d'onde  $\Psi(\vec{r})$ :



$$\langle \vec{r} \rangle = \int_V \vec{r} \Psi^2(\vec{r}) dV \approx \sum_{\vec{r}_i} \vec{r}_i P(\vec{r}_i)$$

$\langle \vec{r} \rangle$  est la valeur moyenne de la distribution de probabilité  $|\Psi(\vec{r}_i)|^2 = P(\vec{r}_i)$ . C'est la valeur qu'on peut attendre au moyenne si on fait beaucoup de mesures de la position de l'électron auxquels on obtient chaque fois un certain valeur  $\vec{r}_i$ .

Quelle est la probabilité totale de trouver la particule dans la boîte?

$$P^{tot} = \int_0^L P(x) dx = \frac{2}{L} \int_0^L \sin^2 \left( \pi \frac{x}{L} \right) dx$$

$$\sin^2 \left( \frac{\alpha}{2} \right) = \frac{1 - \cos \alpha}{2}$$

$$\frac{\alpha}{2} = \pi \frac{x}{L}$$

$$P^{tot} = \frac{2}{L} \frac{1}{2} \int_0^L \left( 1 - \cos \left( \frac{2\pi}{L} x \right) \right) dx$$

$$\int \cos(\beta) d\beta = \sin \beta$$

$$\int \cos(\beta) dx = \frac{L}{2\pi} \sin \beta$$

$$d\beta = \frac{2\pi}{L} dx$$

$$P^{tot} = \frac{1}{L} \int_0^L \left( 1 - \cos \left( \frac{2\pi}{L} x \right) \right) dx$$

$$P^{tot} = \frac{1}{L} \left( x - \frac{L}{2\pi} \sin \left( \frac{2\pi}{L} x \right) \right) \Big|_0^L$$

$$P^{tot} = \frac{1}{L} \left( L - \frac{L}{2\pi} \sin \left( \frac{2\pi}{L} L \right) - 0 + 0 \right)$$

$$P^{tot} = 1$$

## Equation d'onde pour les particules

dérivons d'une part par rapport au temps, et d'autre part par rapport à l'espace la fonction d'onde décrite précédemment. Nous obtenons ainsi :

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \int \frac{-iE}{\hbar} \psi_0 e^{i(p \cdot x - Et)/\hbar} dk \quad \times i \hbar$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = - \int \frac{p^2}{\hbar^2} \psi_0 e^{i(p \cdot x - Et)/\hbar} dk \quad \times \frac{\hbar^2}{2m}$$

$$E(k) = \frac{1}{2} m V^2 + U(x) = \frac{p^2(k)}{2m} + U(x)$$

$$\begin{aligned} i \hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} &= \int \left( E - \frac{p^2}{2m} \right) \psi_0 e^{i(p \cdot x - Et)/\hbar} dk \\ &= \int U(x, t) \psi_0 e^{i(p \cdot x - Et)/\hbar} dk = U(x, t) \Psi(x, t) \end{aligned}$$

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

C'est la célèbre équation de Schrödinger

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

On remarque qu'il s'agit d'une équation aux dérivées partielles linéaire. Le premier membre représente l'action sur la fonction d'onde d'un opérateur  $\mathbf{H}$  défini par :

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

$$H \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

L'équation de propagation de ce paquet d'ondes est :

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

Fonction d'onde de la  
particule (avec sa  
position  $r$ )

Energie cinétique  
de la particule

Energie potentielle  
de la particule

Une particule est ainsi représentée par une fonction d'onde :

$$\Psi(r, t)$$

Planck's constant

Called the 'del-squared operator',  
this quantity describes how the  
wavefunction,  $\Psi$ , changes from  
one place to another

A mathematical quantity called an  
'imaginary number'. It is equal to  
the square root of minus one

The diagram shows the Schrödinger equation: 
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$
 Lines connect descriptive text blocks to specific parts of the equation: Planck's constant to  $\hbar$ ; 'del-squared operator' to  $\nabla^2$ ; mass to  $m$ ; forces to  $V$ ; imaginary number to  $i$ ; and the time derivative to  $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ .

The mass of the particle  
being described

Describes the forces  
acting on the particle

Describes how  $\Psi$   
changes its shape  
with time

$$H\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

$$H\Psi(\vec{r}, t) = E \Psi(\vec{r}, t)$$

On peut établir des règles de correspondance entre l'énergie et la dérivation par rapport au temps et entre l'impulsion et la dérivation par rapport à l'espace :

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

&

$$\vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

Soit encore :

$$p_x \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$p_y \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$$

$$p_z \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\vec{p}^2 = -\hbar^2 \Delta = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

Pour  $U = 0$  l'équation de Schrödinger s'écrit:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Cette équation admet pour solution :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$$

$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\Psi_0|^2$  : Densité de probabilité de présence uniforme dans tout l'espace ! ce résultat n'est pas physique. Une telle onde ne peut pas représenter une particule car elle n'est pas carré sommable.  $\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dr^3$  diverge.

## Remarques

**L'équation de Schrödinger obéit aux conditions suivantes:**

- i) La solution de cette équation doit obéir à la loi de superposition, caractéristique des ondes en général.**  
**Si  $\psi_1$  et  $\psi_2$  sont solutions de l'équation d'onde, alors  $a\psi_1 + b\psi_2$  l'est aussi, a et b sont des constantes.**  
**Par conséquent, L'équation d'onde doit être linéaire et homogène.**
- ii) Si l'équation est du premier ordre en  $\frac{\partial}{\partial t}$ , la connaissance de  $\psi$  à  $t = 0$  suffit pour connaître  $\psi$  à  $t$  ultérieur.**
- iii) Les prévisions de cette équation d'onde doivent se raccorder avec celles de la mécanique classique.**  
**C'est ce qu'on appelle le principe de correspondance.**  
**Ceci suggère une certaine analogie entre cette équation et celle de la mécanique classique.**

# Le paquet d'ondes

$\hbar$

La superposition des ondes planes de vecteurs d'ondes voisins conduit à ce qu'on appelle un paquet d'ondes.

$$\begin{cases} \Psi_1 = \Psi_0 e^{-i(\omega_1 t - k_1 x)} \\ \Psi_2 = \Psi_0 e^{-i(\omega_2 t - k_2 x)} \end{cases}$$

Avec

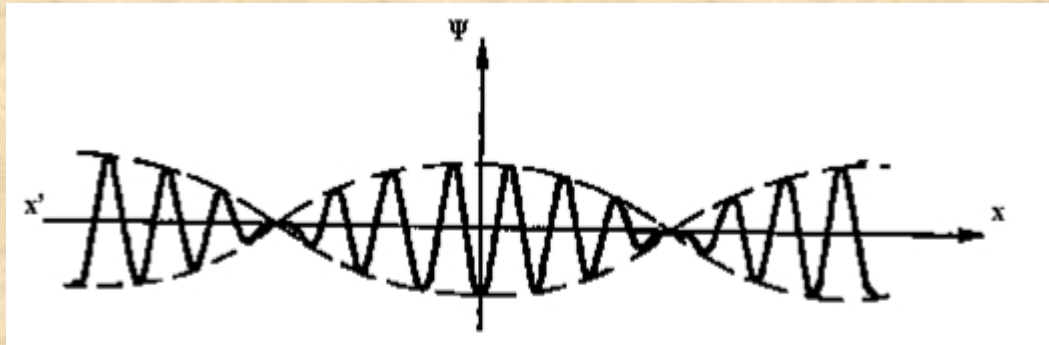
$$\begin{cases} \omega_1 = \omega_0 - \Delta\omega & \text{et} & \omega_2 = \omega_0 + \Delta\omega \\ k_1 = k_0 - \Delta k & \text{et} & k_2 = k_0 + \Delta k \end{cases}$$

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 = \Psi_0 (e^{-i(\omega_1 t - k_1 x)} + e^{-i(\omega_2 t - k_2 x)})$$

$$\Psi(x, t) = 2\Psi_0 \cos(\Delta\omega t - \Delta k x) e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)}$$

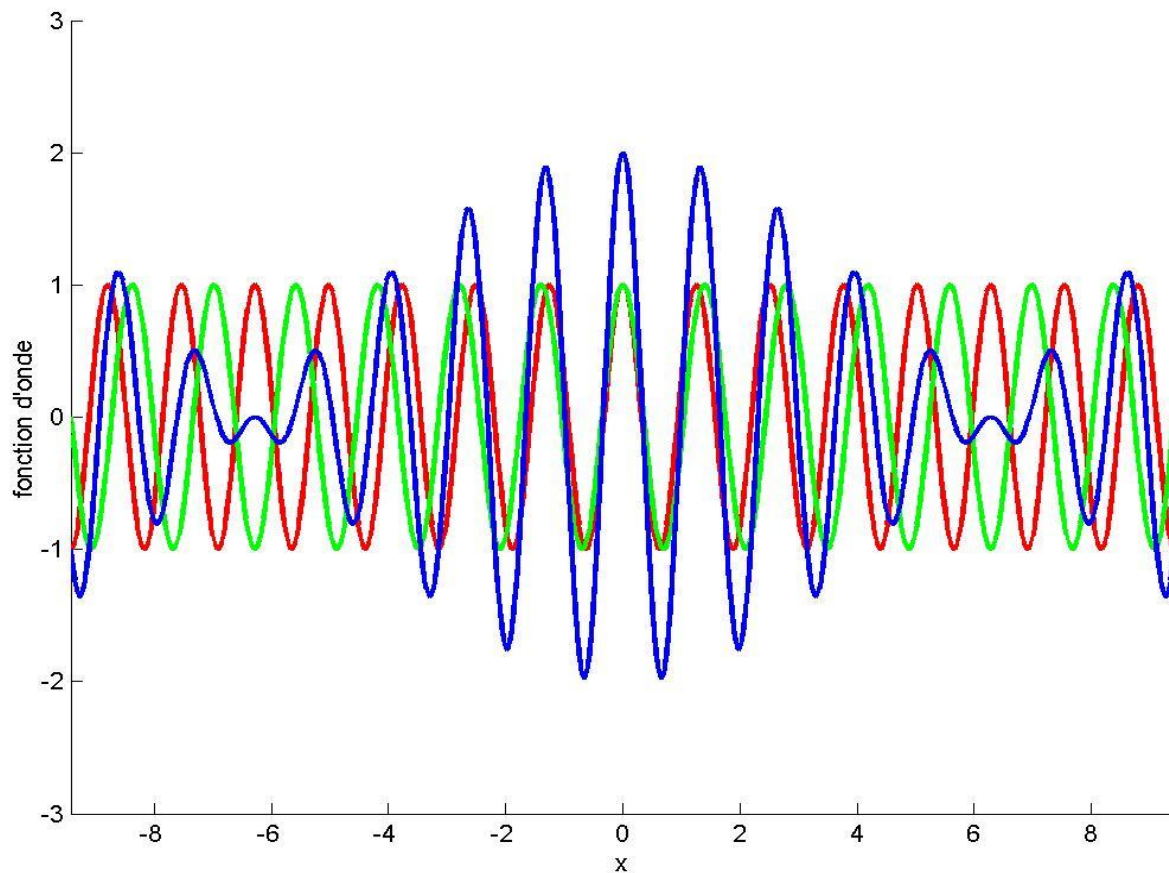
$\hbar$

L'amplitude de l'onde résultante est donc  $2\Psi_0\cos(\Delta\omega.t - \Delta k.x)$  et une photographie instantanée de cette onde donne une image telle que celle représentée sur la **figure 2.12**.



On remarque que la densité de probabilité cesse d'être uniforme dans tout l'espace puisqu'elle est maximale dans certaines régions et nulle dans d'autres.

L'énergie demeure toutefois infinie car la particule est délocalisée sur tout l'axe  $x'x$ .



**Superposition de deux ondes**

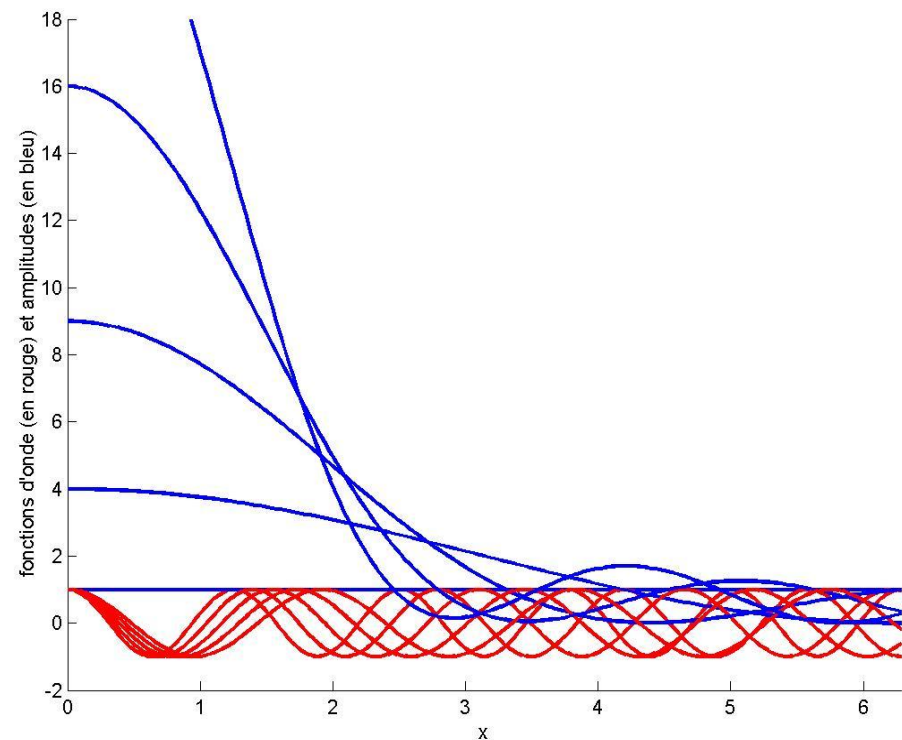
On peut penser que le modèle s'améliore en superposant un plus grand nombre d'ondes de fréquences voisines de sorte que  $\Psi(x, t)$  s'écrive :

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^N g_n e^{-i(\omega_n t - k_n x)}$$

La solution du problème ne peut être qu'une superposition infinie d'ondes planes ayant des vecteurs d'ondes  $k$  très voisins. On parvient ainsi à la définition du paquet d'ondes dont l'expression est :

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{-i(\omega t - kx)} dk$$





## Superposition de plusieurs ondes

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5$$

$$\psi = \varphi_1 \psi_1 + \varphi_2 \psi_2 + \varphi_3 \psi_3 + \dots + \varphi_n \psi_n + \dots$$

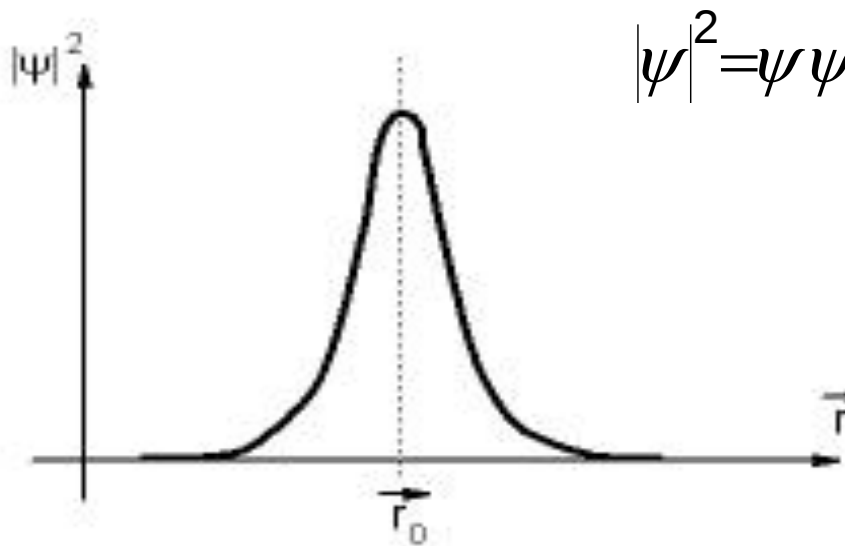


Distribution du **vecteur** position au cours du temps  
(fonction d'onde)

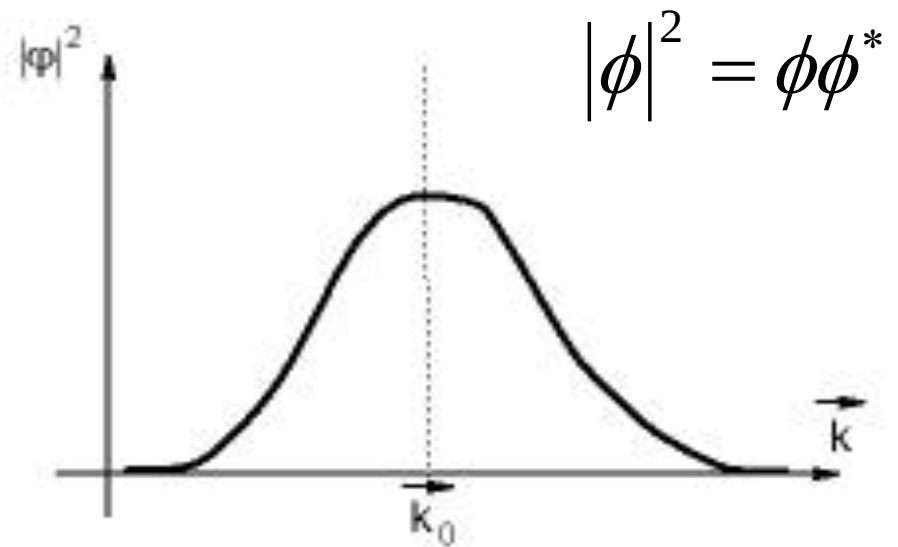
$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\vec{k}, t) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d\vec{k}$$

Distribution du vecteur d'onde au cours du temps

$$\phi(\vec{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(\vec{r}, t) e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d\vec{r}$$



Distribution d'amplitude en position



Distribution d'amplitude en vecteur d'onde

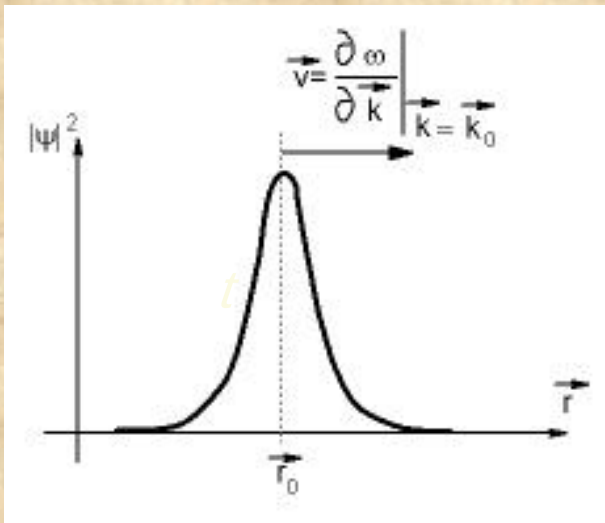
**Isométrie de la  
Transformation  
de Fourier :**

$$(\psi_1, \psi_2) = (\phi_1, \phi_2)$$



$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 d\vec{r} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi|^2 d\vec{k}$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\vec{k}, t) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d\vec{k}$$



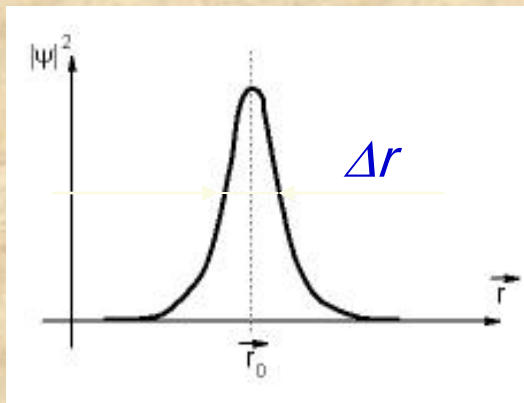
$$\omega(\vec{k}) = \omega_0 + \vec{v} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)$$



$$\psi(\vec{r}, t) = a(\vec{r}, t) e^{i(\vec{k}_0 \cdot \vec{r} - \omega_0 t)}$$

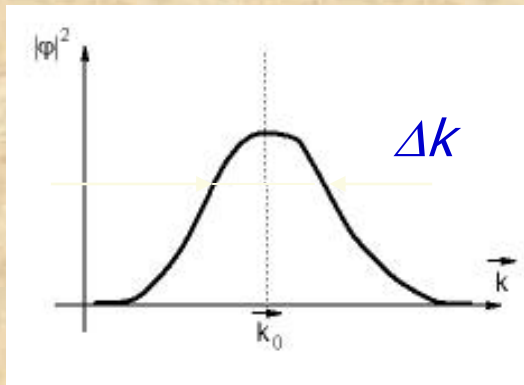
$$|\psi|^2 = \psi \psi^* = |a|^2$$

$$a(\vec{r}, t + \Delta t) = a(\vec{r} - \vec{v} \Delta t, t)$$



$$\langle \vec{r} \rangle = \vec{r}_0 = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \vec{r} |\psi|^2 d\vec{r}}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 d\vec{r}}$$

$$\Delta r = \langle \|\vec{r} - \vec{r}_0\|^2 \rangle \\ = \langle \vec{r} \cdot \vec{r} \rangle - \vec{r}_0 \cdot \vec{r}_0$$



$$\langle \vec{k} \rangle = \vec{k}_0 = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \vec{k} |\varphi|^2 d\vec{k}}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi|^2 d\vec{k}}$$

$$\Delta k = \langle \|\vec{k} - \vec{k}_0\|^2 \rangle \\ = \langle \vec{k} \cdot \vec{k} \rangle - \vec{k}_0 \cdot \vec{k}_0$$

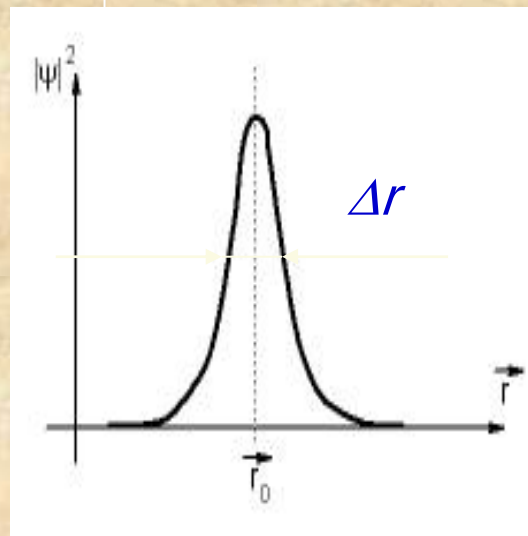
*Relation d'incertitude :  $\Delta k \cdot \Delta r \geq 1/2$*

$\psi(\vec{r},t)$  : fonction d'onde



$$dP = |\psi|^2 dr$$

Probabilité de trouver la particule à l'instant  $t$   
dans un volume  $dr$  autour de  $r$



$|\psi|^2$  : densité de probabilité



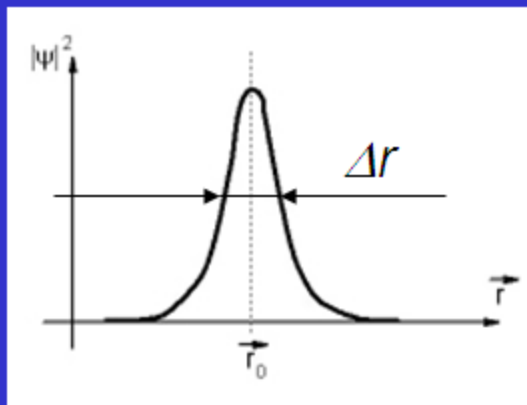
$$\int |\psi|^2 dr = 1$$

$\psi(\vec{r}, t)$  : fonction d'onde



$$dP = |\psi|^2 d\vec{r}$$

Probabilité de trouver la particule à l'instant  $t$   
dans un volume  $d\vec{r}$  autour de  $\vec{r}$



$|\psi|^2$  : densité de probabilité



$$\int |\psi|^2 d\vec{r} = 1$$

Fonction d'onde

Position

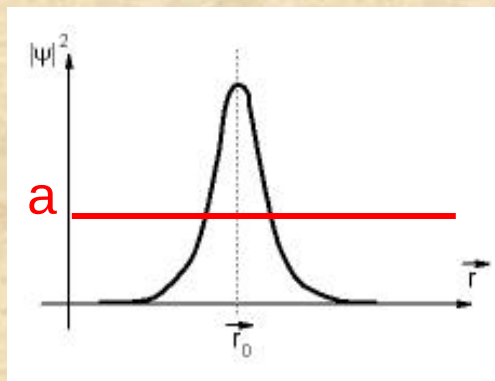
Temps

$$\psi(r,t) = a e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

Densité de probabilité

Vecteur impulsion

Énergie



$$\int |\psi|^2 dr \neq 1 !!$$

Planck's constant

Called the 'del-squared operator', this quantity describes how the wavefunction,  $\Psi$ , changes from one place to another

A mathematical quantity called an 'imaginary number'. It is equal to the square root of minus one

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

The mass of the particle being described

Describes the forces acting on the particle

Describes how  $\Psi$  changes its shape with time

$$\vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

&

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

Une photographie du train d'onde à l'instant  $t = 0$  conduit à :

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk$$

**TF**

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|^2 dk$$

Ce formalisme se généralise dans l'espace à trois dimensions et on aura :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(k) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d\vec{k}$$

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(k) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{k}$$

On utilise souvent en mécanique quantique l'impulsion à la place du vecteur d'onde ce qui conduit à :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int G(p) e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar} d\vec{p}$$

Où

$$\vec{p} \rightarrow \hbar \vec{k}$$

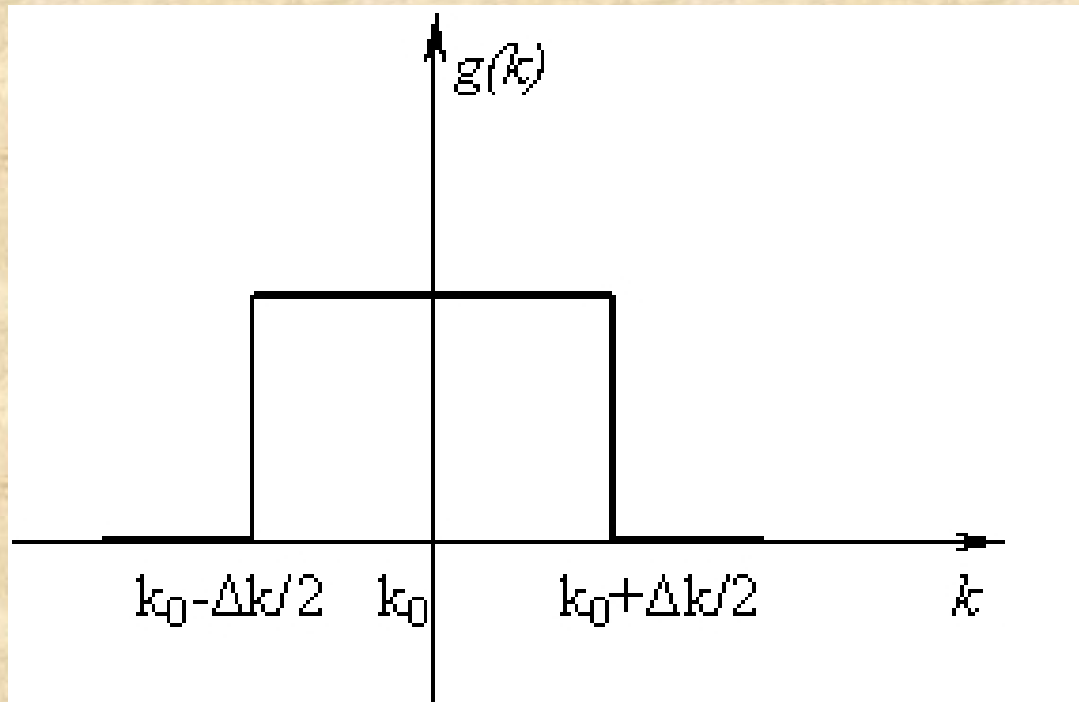
$$G(\vec{p}) = g(p/\hbar) / \sqrt{\hbar}$$

$$E = \hbar \omega$$

## Exemple : Paquet d'ondes carré

Prenons pour  $g(k)$  la fonction créneau décrite par :

$$g(k) = \begin{cases} g_0 & \text{pour } k_0 - \frac{\Delta k}{2} \leq k \leq k_0 + \frac{\Delta k}{2} \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$



Variation de l'amplitude  $g(k)$  en fonction du module du vecteur d'onde pour un paquet d'ondes carré quasi-monochromatique

Une photographie du paquet d'ondes à l'instant  $t = 0$  est donnée par :

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} g_0 e^{ikx} dk$$

Le calcul de l'intégrale donne :

$$\Psi(x, 0) = \frac{g_0}{\sqrt{2\pi}} \left[ \frac{e^{ikx}}{ix} \right]_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} = \frac{\Delta k}{\sqrt{2\pi}} g_0 \frac{\sin(x \frac{\Delta k}{2})}{x \frac{\Delta k}{2}} e^{ik_0 x}$$

Soit

$$\Psi(x, 0) = \Psi_0 \frac{\sin(x \frac{\Delta k}{2})}{x \frac{\Delta k}{2}} e^{ik_0 x}$$

Avec

$$\Psi_0 = \frac{\Delta k}{\sqrt{2\pi}} g_0$$

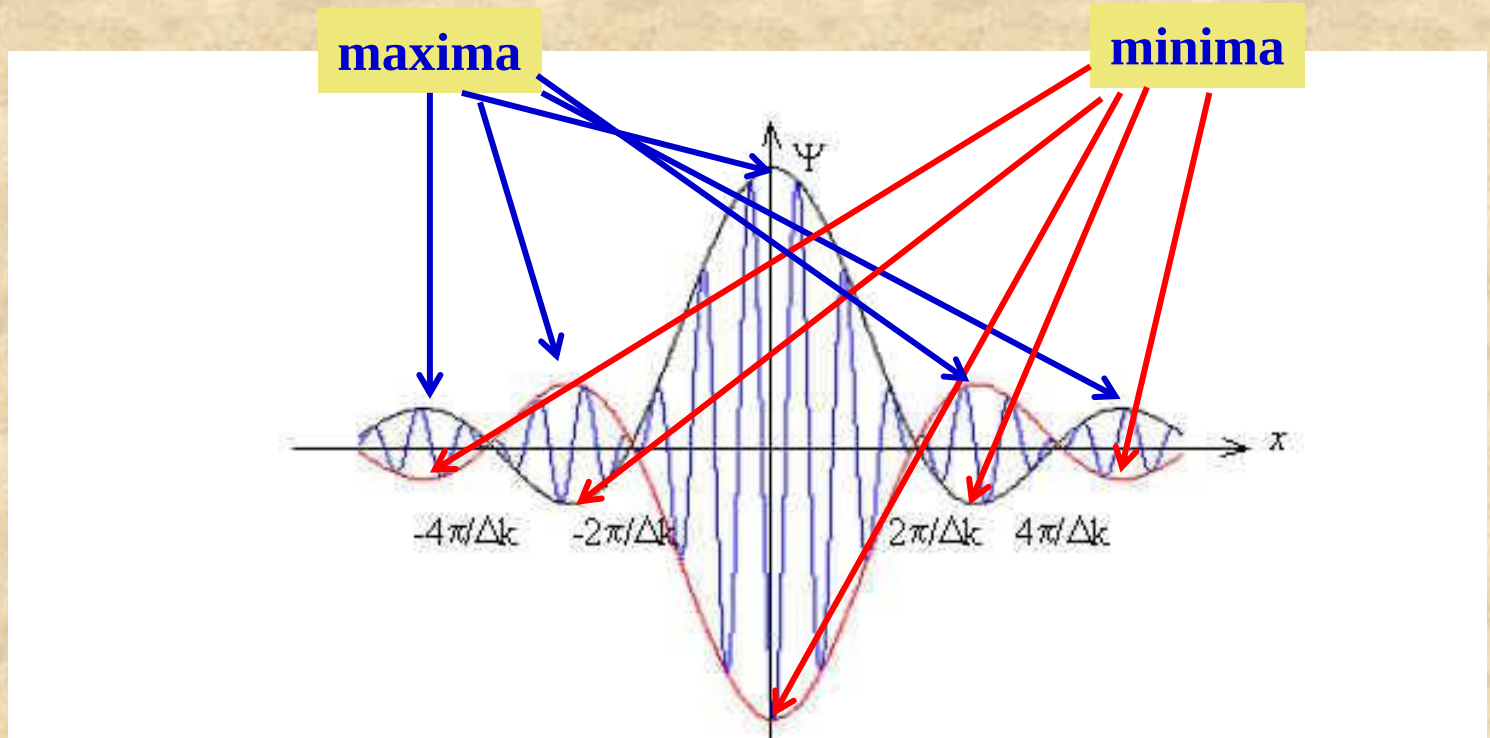


Image à l'instant  $t = 0$  d'un paquet d'ondes carré quasi-monochromatique

$\Psi(x, 0)$  possède une infinité de maxima et de minima

La particule est essentiellement localisée au voisinage de  $x = 0$  avec une étendue  $\Delta x$  égale à la largeur à mi-hauteur du pic central.

$$\Delta x = \frac{2\pi}{\Delta k}$$

La densité de probabilité s'écrit :

$$|\Psi(x, 0)|^2 = \Psi(x, 0)\Psi^*(x, 0) = \Psi_0^2 \left( \frac{\sin(x \frac{\Delta k}{2})}{x \frac{\Delta k}{2}} \right)^2$$

L'énergie véhiculée par la particule est alors telle que :

$$W = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx = \Psi_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{\sin(x \frac{\Delta k}{2})}{x \frac{\Delta k}{2}} \right)^2 dx = \frac{2\Psi_0^2}{\Delta k}$$

Car

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{\sin u}{u} \right)^2 du = 1$$

# Vitesse de phase et vitesse de groupe

## Vitesse de phase

A l'intérieur du paquet d'ondes se superposent plusieurs ondes monochromatiques de phase  $\alpha = k.x - \omega t$ . Chaque plan d'onde, caractérisé par une phase constante, évolue au cours du temps

Sa vitesse de propagation le long de la direction du vecteur d'onde  $\vec{k}$  s'obtient en écrivant :

$$\frac{d\alpha}{dt} = k \frac{dx}{dt} - \omega = 0 \quad \Rightarrow \quad V_{\varphi} = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k}$$

L'expression vectorielle :  $\Rightarrow \quad \vec{V}_{\varphi} = \frac{\omega}{k^2} \vec{k}$

Propagation d'un photon dans le vide

$$V_{\varphi} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = c$$

## Vitesse de groupe

Lorsque le milieu est dispersif et c'est le cas le plus général, la propagation de l'onde centrale s'effectue à une vitesse différente de celle des ondes latérales participant au paquet. Pour déterminer la vitesse à laquelle se propage le centre du paquet nous allons développer  $\omega(k)$  en une série de Taylor autour du nombre d'onde moyen  $k_0$  et dans l'intervalle  $\Delta k$  mesurant l'étendue de  $g(k)$ , soit :

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} (k - k_0) + \left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k=k_0} \frac{(k - k_0)^2}{2!} + \dots$$

En se limitant au premier terme du développement et en posant :

$$\omega(k_0) = \omega_0$$

$$\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} = V_g$$


$$\omega(k) = \omega(k_0) + V_g (k - k_0)$$

En introduisant  $\omega(k) = \omega(k_0) + V_g(k - k_0)$

dans le paquet d'ondes décrit par

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{-i(\omega t - kx)} dk \quad (2.62)$$

en utilisant pour simplifier un paquet carré, on obtient après un calcul simple :

$$\Psi(x, t) = g_0 e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)} \int_{-\frac{\Delta k}{2}}^{+\frac{\Delta k}{2}} g(k) e^{-i(k - k_0)(V_g t - x)} dk$$

Le calcul de l'intégrale conduit en définitive à :

$$\Psi(x, t) = A(x, t) e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)}$$

Où

$$A(x, t) = g_0 \Delta k \frac{\sin\left[\frac{\Delta k}{2}(V_g t - x)\right]}{\frac{\Delta k}{2}(V_g t - x)}$$

l'amplitude d'une onde approximativement monochromatique et  $k_0 x - \omega_0 t$  comme sa phase

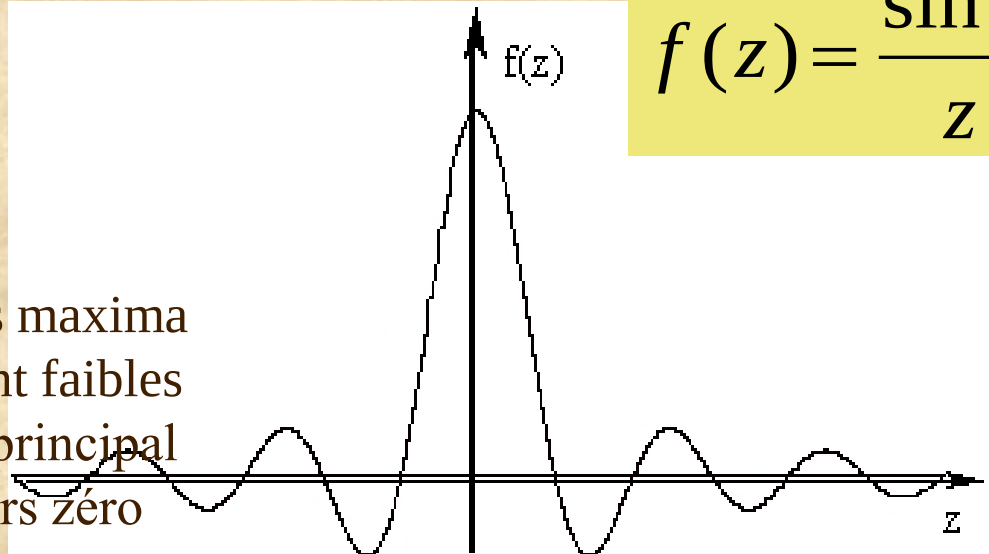
$$A(x, t) = g_0 \Delta k \frac{\sin z}{z}$$

avec

$$z = \frac{\Delta k}{2}(V_g t - x)$$

$$f(z) = \frac{\sin z}{z}$$

Elle passe alternativement par des maxima et des minima dont les valeurs sont faibles comparées à celles du maximum principal à  $z = 0$  et converge rapidement vers zéro



$$\lim_{z \rightarrow 0} \frac{\sin z}{z} = 1$$

 $\Rightarrow$ 

$$V_g t - x = 0$$

 $\Rightarrow$ 

$$\frac{dx}{dt} = V_g$$

$$V_g = \frac{d\omega}{dk}$$

$$V_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(k) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d\vec{k}$$

$$V_g = \left| \vec{\nabla}_k \omega(\vec{k}) \right|_{k=k_0}$$

$$V_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp}$$

$$V_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp}$$

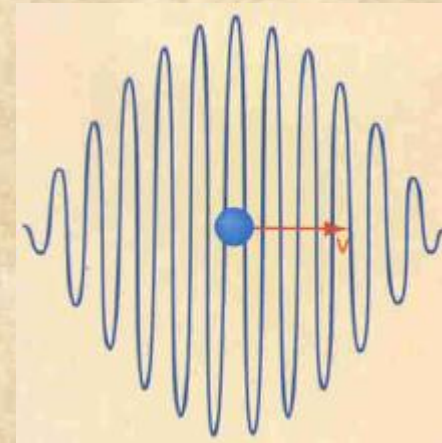
La vitesse de groupe correspond donc à la vitesse de déplacement du centre du paquet d'ondes pour lequel toutes les ondes sont en phase.

La vitesse de groupe serait égale à :  $V_g = \left| \vec{\nabla}_k \omega(\vec{k}) \right|_{k=k_0}$

*Les composantes du paquet d'ondes se translatent avec la vitesse de phase  $v_\varphi$*

*Le maximum du paquet d'ondes se déplace avec la vitesse de groupe  $v_g$ .*

**La particule est associée à un groupe (paquet) d'ondes dont le maximum se déplace à la vitesse de la particule!**



### Cas d'une particule libre non relativiste:

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



$$\omega(t) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

$$V_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}$$

$$V_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar \omega}{p} = \frac{E}{p}$$

### Cas d'une particule libre relativiste:

$$V_\phi = \frac{\hbar \omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{\sqrt{p^2 C^2 + m_0^2 C^4}}{p} = C \left( \sqrt{1 + \frac{m_0^2 C^2}{p^2}} \right) > C$$

$$\begin{aligned} V_g &= \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{d(\sqrt{p^2 C^2 + m_0^2 C^4})}{dp} = \frac{2pC^2}{2\sqrt{p^2 C^2 + m_0^2 C^4}} \\ &= \frac{2pC^2}{2pC\sqrt{1 + \frac{m_0^2 C^4}{p^2 C^2}}} = \frac{C}{\sqrt{1 + \frac{m_0^2 C^4}{p^2 C^2}}} < C \end{aligned}$$

Seule la vitesse de groupe a donc un sens physique.

# Relations d'incertitude de Heisenberg

# Relation position – impulsion (Inégalité spatiale)

À partir

✚ Train d'onde à une dimension



Position mal définie, quantité de mouvement bien définie



Position mieux définie, quantité de mouvement bien définie



Position bien définie, quantité de mouvement mal définie

$$\Delta x = n\lambda = n \frac{h}{p}$$

$$\frac{\Delta \lambda}{\lambda} = \frac{\Delta p}{p} = \frac{1}{n}$$

$\Rightarrow$

$$\frac{\Delta p}{p} = \frac{h}{p \Delta x}$$

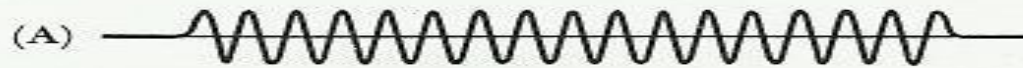
$\Rightarrow$

$$\Delta p \cdot \Delta x \sim h$$

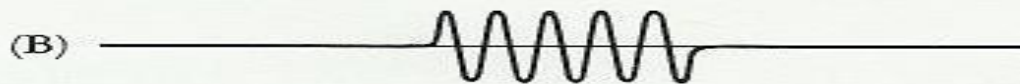
Inégalité (ou Incertitude) Spatiale d'Heisenberg



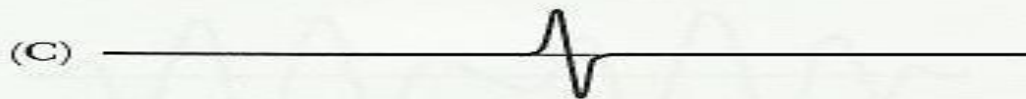
Position mal définie  
Quantité de mouvement bien définie



Position mieux définie  
Quantité de mouvement moins bien définie



Position bien définie  
Quantité de mouvement très mal définie

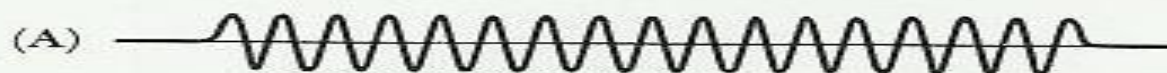


Position très bien définie  
Quantité de mouvement très mal définie

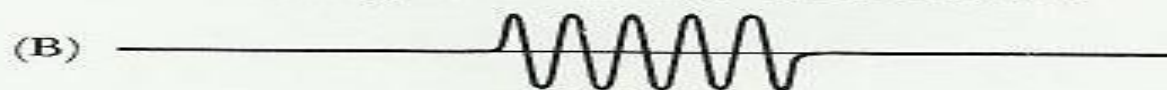


**Fig 6.5 ABCD** Illustration de notre discussion de la relation d'incertitude position-quantité de mouvement. Une position bien définie requiert un train d'onde court. Une quantité de mouvement bien définie requiert de nombreux cycles de sinusöide bien développés. Ces deux conditions sont en conflit l'une avec l'autre.

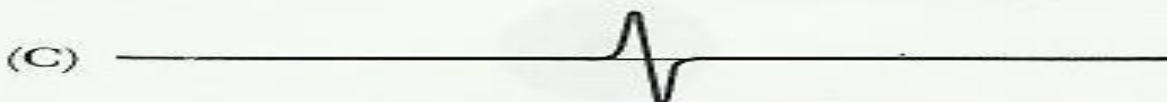
Temps mal défini  
Fréquence très bien définie



Temps mieux défini  
Fréquence moins bien définie



Temps bien défini  
Fréquence très mal définie

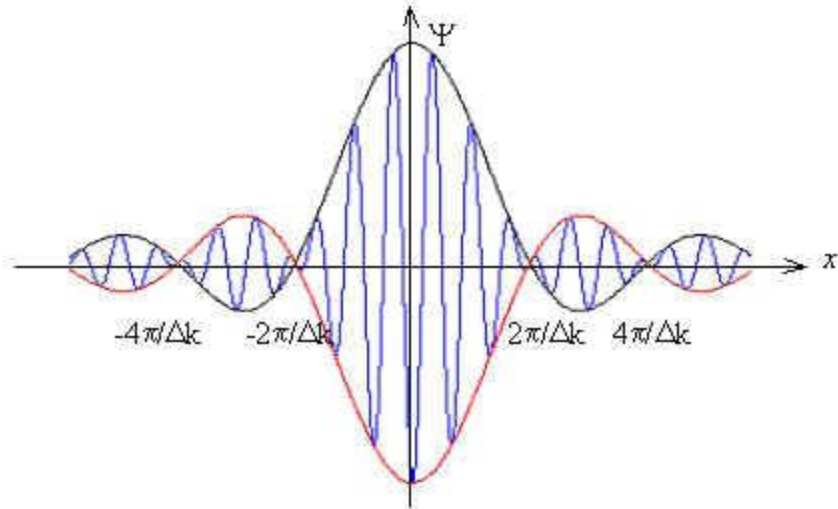


Temps très bien défini  
Fréquence très mal définie



**Fig. 6.18 ABCD** Illustration de la relation d'incertitude temps-fréquence. Ces figures sont identiques aux figures 6.5 ABCD, sauf les légendes.

## ✚ Paquet d'ondes carré



$$\Delta x = \frac{2\pi}{\Delta k}$$

$$\Delta x \cdot \Delta k \approx 2\pi$$

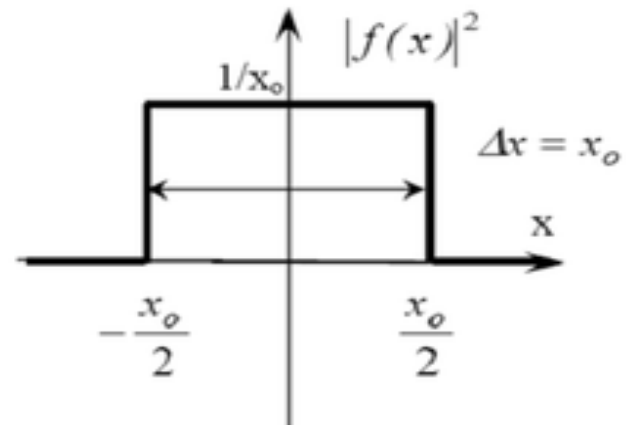
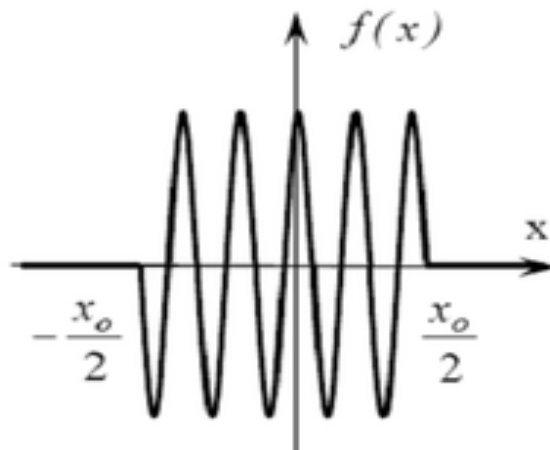
$$\Rightarrow$$

$$\Delta x \cdot (\hbar \Delta k) \approx 2\pi \hbar$$

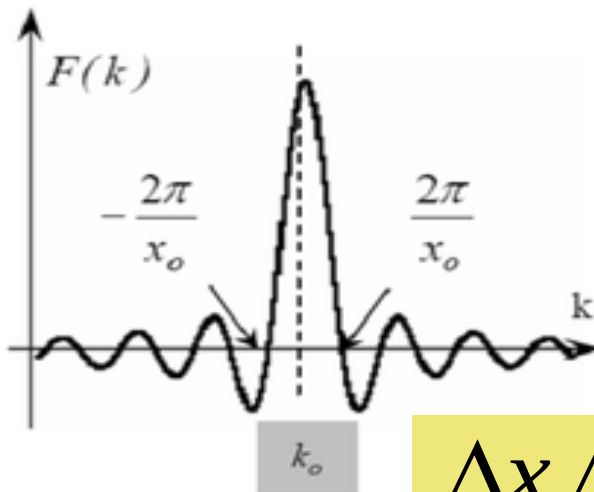
$$\Delta x \cdot \Delta p \approx h$$

# Transformée de Fourier

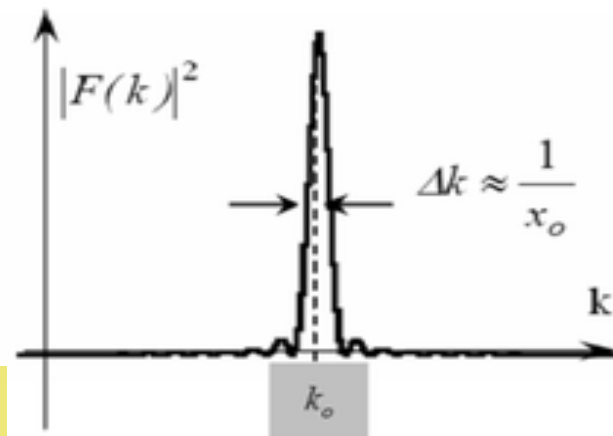
Fonction d'onde



Transformée de Fourier



Dispersion du vecteur d'onde



$$\Delta x \cdot \Delta k \geq 1$$

$$\Delta x . \Delta p \geq \hbar$$

$$\Delta x . \Delta p_x \geq \hbar$$

$$\Delta y . \Delta p_y \geq \hbar$$

$$\Delta z . \Delta p_z \geq \hbar$$

Ces relation d'indétermination montrent que si on connaît parfaitement la vitesse de la particule.

$$\Delta p = 0$$

$$\Rightarrow$$

$$\Delta x \rightarrow \infty$$

## Relation temps - énergie (Inégalité temporelle)

$$\Delta t \sim \frac{\Delta x}{V_g} \sim \frac{\Delta k}{\Delta \omega} \Delta x$$



$$\Delta t . \Delta \omega \sim \Delta k . \Delta x$$



$$\Delta t . \hbar \Delta \omega \sim \hbar \Delta k . \Delta x$$



$$\Delta E . \Delta t = \Delta p . \Delta x$$



$$\Delta E . \Delta t \geq \hbar$$

Certains couple de grandeurs en interaction constante, comme vitesse-position ou temps-énergie, ne peuvent être déterminés simultanément avec le même degré de précision

## Comparaison physique classique/quantique

La mécanique classique est une théorie générale qui explique des phénomènes lorsque la mécanique classique échoue. La physique quantique se ramène à la physique classique lorsque les systèmes étudiés possèdent des masses, des énergies ou des températures suffisamment élevées, ou, formellement, lorsque la constante de Planck devient infiniment petite :  $\hbar \rightarrow 0$ . Le tableau suivant résume les principales différences entre la mécanique classique et la mécanique quantique.

| Classique                                                             | Quantique                                                               |
|-----------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------|
| Position et quantité de mouvement sont toujours exactement déterminés | $\Delta r \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$<br>$\Psi(r, t), P(r, t)$       |
| Spectres d'énergie continus                                           | Énergie quantifiée                                                      |
| $E_c(T = 0) = 0$                                                      | $E_c(T = 0) > 0$                                                        |
| Lois de Newton<br>$\vec{f} = m\vec{a} = m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2}$     | Équation de Schrödinger<br>$\hat{H}\Psi(r, t) = i\hbar\frac{d\Psi}{dt}$ |

Ernest Solvay (1838 – 1922) épris de science et ... riche finance un congrès réunissant les meilleurs physiciens... Le premier en 1911, le 21ème en 1998...

Conseil de Solvay de 1927



|          |         |           |         |           |             |               |        |            |        |           |
|----------|---------|-----------|---------|-----------|-------------|---------------|--------|------------|--------|-----------|
| Picard   | Henriot | Ehrenfest | Herzen  | de Donder | Schrödinger | Verschaaffelt | Pauli  | Heisenberg | Fowler | brillouin |
| Debye    | Knudsen | Bragg     | Kramers | Dirac     | Compton     | L. de Broglie | Born   | Bohr       |        |           |
| Langmuir | Planck  | Mme Curie | Lorentz | Einstein  | Langevin    | Guye          | Wilson | Richardson |        |           |