

Chapitre 1 De la mécanique classique à la mécanique quantique

1.1 Situation de la physique avant la fin du 19^{ième} siècle :

Dans le but de comprendre les phénomènes physiques qui nous entourent, les physiciens se sont mis à étudier la lumière et la matière. Leur vision sur la nature de ces deux entités a évolué dans le temps.

La nature de la matière :

A l'antiquité déjà, on avait émis l'hypothèse que la matière serait constituée de petites particules indivisibles, mais cette hypothèse n'a pas été dominante pour les penseurs grecs. Au XVII^e, Newton avait repris cette idée. Il avait écrit : « *Il me semble probable qu'au commencement, Dieu créa la matière en particules pleines, massives, dures, impénétrables et mobiles ...* »

Au cours du temps, l'hypothèse atomique s'est renforcée. En chimie, on avait remarqué que les substances se combinent en proportions fixes pour donner de nouveaux composés. En thermodynamique, on pouvait expliquer la pression par les chocs de particules sur les parois. A la fin du XIX^e siècle, tous les physiciens étaient convaincus de l'existence des atomes. Cependant, à cette époque, on disait que ces atomes sont parfaitement localisables dans l'espace, que leur mouvement est décrit par les lois de Newton et surtout, que pour n'importe quelle particule, si on connaît à un instant les variables dynamiques, c'est-à-dire la position et la quantité de mouvement, alors on sera en mesure de déduire ces variables dynamiques à n'importe quel instant ultérieur, ce qui bien entendu permet de déterminer la trajectoire. La vision du monde était déterministe, basée sur le principe de causalité.

La nature de la lumière :

Pour Newton, la lumière est constituée de corpuscules. Mais, pour Huygens, qui était le contemporain de Newton, la lumière est plutôt une onde. Cependant, c'est l'hypothèse corpusculaire qui a été dominante jusqu'au début du XIX^e siècle. C'est-à-dire, jusqu'au jour où Young a réalisé sa célèbre expérience des 'fentes d'Young'. Il a obtenu des images d'interférence avec la lumière ce qui a permis de valider l'hypothèse ondulatoire.

En parallèle, des progrès avaient été réalisés en électricité et en magnétisme. Faraday avait observé les lignes formées par la limaille de fer au voisinage d'un aimant ce qui a permis d'introduire la notion de champ. Ensuite, Maxwell en 1873 a formulé l'ensemble de tous les phénomènes électriques et magnétiques en seulement quatre équations. La solution de ces équations est une onde transverse dont les variables oscillantes sont les champs électrique et magnétique. Cette onde se déplace à la vitesse constante qui est celle de la lumière.

On avait déduit alors que la lumière (et plus généralement le rayonnement) n'est rien d'autre qu'une onde électromagnétique de fréquence appropriée.

Ainsi, à la fin du XIX^e siècle, nul ne doutait du fait que la lumière est une onde et que la matière est constituée par des corpuscules. La matière est régie par les lois de Newton tandis que la lumière obéit à la théorie de Maxwell. Tous les phénomènes physiques connus à cette époque s'expliquaient bien dans le cadre de ces deux disciplines qui forment ce qu'on appelle 'la mécanique classique'. Les physiciens pensaient être sur le point de comprendre tous les phénomènes physiques de l'univers. Mais cet optimisme allait bientôt être brisé !

En effet, à l'aube du XX^e siècle et avec les progrès de la technologie, il apparut des phénomènes nouveaux que la physique classique ne pouvait plus expliquer. Dans les paragraphes suivants nous allons décrire certains de ces phénomènes.

1.2 Effet photoélectrique :

1.2.1 Expérience :

Une cellule photoélectrique est constituée d'une enceinte transparente dans laquelle il y'a un vide poussé et deux plaques : Une cathode C et une anode A. Les deux plaques sont reliées à un générateur de façon à établir une ddp U_{AC} (figure 1.3)

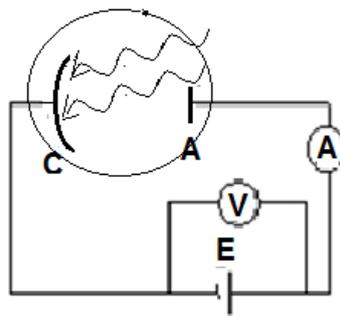


Fig.1.3. Cellule photoélectrique

Lorsqu'on éclaire la photocathode par une lumière monochromatique, il apparaît instantanément un courant I dans le circuit. Mais ce courant n'apparaît que si la fréquence de la radiation incidente $\nu \geq \nu_0$ telle que ν_0 est une constante qui caractérise la cathode. C'est la fréquence seuil. Dans le cas où $\nu < \nu_0$ aucun courant n'apparaît quelque soit l'intensité de l'onde lumineuse et la durée de l'éclairement. On a fait des mesures qui ont donné les courbes représentées dans les figures(1.4) et (1.5).

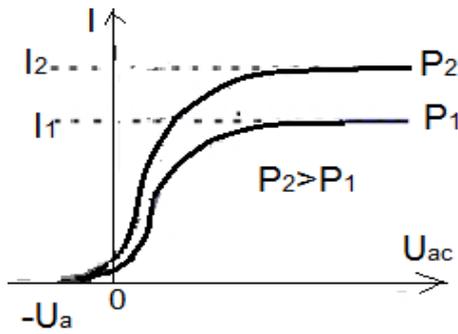


Fig.(1.4) Caractéristique d'une cellule photoélectrique pour une fréquence donnée.

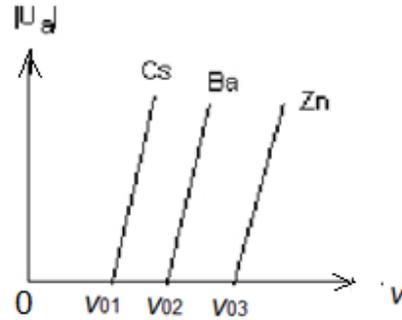


Fig.(1.5) Variation du potentiel d'arrêt en fonction de la fréquence.

On remarque que :

1-Si U_{ac} augmente, alors I augmente aussi et tend vers une limite : Intensité de saturation. Celle-ci augmente avec la puissance du faisceau incident (Fig.(1.4)).

2-Si on applique une certaine tension négative $U_{AC} = -U_a$, le courant s'annule. U_a s'appelle le potentiel d'arrêt. U_a augmente avec la fréquence du rayonnement.(Fig.(1.5))

1.2.2 Interprétations classiques :

Les électrons de la cathode accumulent de l'énergie apportée par le champ électromagnétique, ensuite, ils quittent le métal. Si U_{AC} augmente, les électrons sont plus accélérés vers l'anode (ils ne s'accumulent pas) et donnent naissance à un courant plus grand jusqu'à la saturation.

Si U_{AC} est négative, les électrons reviennent vers la cathode et le courant s'annule.

En appliquant le théorème de l'énergie cinétique entre l'anode et la cathode, on écrit :

$$\Delta E_c = E_{cA} - E_{cC} = \sum W_{\vec{F}} \quad (1.9)$$

E_{cA}, E_{cC} représentent respectivement l'énergie cinétique des électrons au niveau de l'anode et de la cathode. Dans ce cas, il n'y a qu'une seule force : la force électrique. C'est une force conservative et par conséquent,

$$W_{\vec{F}} = -\Delta E_P = E_{PC} - E_{PA} = -e(U_C - U_A) = -eU_{CA} \quad (1.10)$$

En combinant les équations (1.9) et (1.10) on obtient :

$$\frac{1}{2} mV_A^2 - \frac{1}{2} mV_C^2 = -eU_{CA} = eU_{AC} \quad (1.11)$$

Si $V_A = 0$, alors

$$\frac{1}{2}mV_C^2 = -e(-U_a) = eU_a$$

$$U_a = \frac{1}{2} \frac{m}{e} V_C^2 \quad (1.12)$$

La mécanique classique explique l'apparition du courant et le potentiel d'arrêt. Néanmoins, un problème persiste. Si la fréquence du rayonnement incident est inférieure à la fréquence seuil le courant n'apparaît pas dans le circuit quelque soit la puissance de ce rayonnement incident. Ce phénomène, la mécanique classique est incapable de l'expliquer.

1.2.3 L'idée d'Einstein :

En 1905, Einstein postule que le champ électromagnétique est constitué d'agglomérations (ou de quantas) d'énergie appelés photons. Chacun porte une énergie E telle que :

$$E = h\nu \quad (1.13)$$

ν étant la fréquence de l'onde électromagnétique.

Si un électron du métal absorbe un photon, il acquiert un quantum d'énergie $h\nu$. Une partie de cette énergie (W_s) sert à quitter le métal et l'autre se transforme en énergie cinétique. L'équation de conservation de l'énergie s'écrit alors:

$$h\nu = W_s + \frac{1}{2}mV_C^2 \quad (1.14)$$

Si $h\nu < W_s$, alors l'électron ne peut pas être libéré. Il ne peut y avoir effet photoélectrique que si la condition $\nu \geq \nu_s$ est satisfaite, $\nu_s = \frac{W_s}{h}$ est la fréquence seuil. Si on augmente la puissance du rayonnement, on augmente le nombre de photons mais pas la fréquence du rayonnement. Les photons ont tous la même énergie $h\nu$ insuffisante pour que l'électron se libère.

Les relations (1.12) et (1.14) donnent :

$$U_a = \frac{h\nu}{e} - \frac{W_s}{e} \quad (1.15)$$

La mécanique quantique explique donc les courbes (1.4) et (1.5).

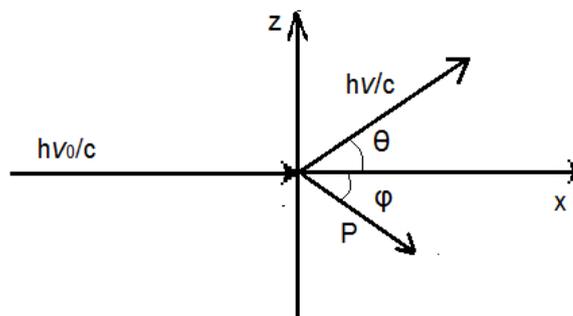
En conclusion, le seul moyen d'expliquer l'effet photoélectrique est de considérer que la lumière a un aspect corpusculaire.

1.3 Effet Compton :

L'expérience du corps noir montre que l'énergie de l'onde électromagnétique est quantifiée. L'effet photoélectrique montre que lors de l'interaction rayonnement-matière, l'onde se comporte comme un faisceau de corpuscules (photons) dont l'énergie est $h\nu$. L'effet Compton complète cette description en montrant que ces photons possèdent aussi une impulsion.

1.3.1 Expérience :

Compton envoie sur un bloc de matière un faisceau de rayons X monochromatique de longueur d'onde λ , dans une direction bien définie (direction Ox). Il recueille la partie du rayonnement diffusée dans une direction faisant un angle θ avec la direction incidente (fig(1.6)).



Fig(1.6) Expérience de Compton

Compton trouve que le rayonnement diffusé possède une longueur d'onde λ' telle que :

$$\text{L'écart } \delta\lambda = \lambda' - \lambda > 0$$

$\delta\lambda$ ne dépend ni de λ ni de la nature du bloc de matière utilisé. $\delta\lambda$ dépend uniquement de l'angle θ

$$\delta\lambda = f(\theta) \quad (1.16)$$

Ce résultat contredit les prévisions classiques qui considèrent qu'il ne devrait pas y avoir de changement de longueur d'onde lors de la diffusion d'une onde électromagnétique par un électron.

1.3.2. Interprétation de Compton :

Compton interprète la diffusion avec changement de longueur d'onde comme une collision élastique entre le photon et l'électron. Comme l'énergie du photon incident est très grande

(Il s'agit d'un rayonnement X) on supposera que l'électron est au repos et on négligera son travail de sortie. Pour retrouver théoriquement la relation expérimentale (1.16), on écrira les équations de conservations de l'énergie et de la quantité de mouvement. Comme l'énergie du photon incident est grande, l'électron aura une grande vitesse après le choc et sera donc relativiste. Une particule est dite relativiste si sa vitesse atteint un dixième de celle de la lumière ($\frac{v}{c} \geq 0.1$). Dans ce cas les théorèmes généraux de la conservation de E et \vec{P} s'appliquent à condition de définir :

$$\text{L'énergie } E = mc^2 \quad (1.17)$$

Avec $m \neq m_0$.

m_0 est la masse au repos, m est la masse en mouvement,

$$\text{La quantité de mouvement } \vec{P} = m\vec{v} \quad (1.18)$$

$$\text{tel que } E \text{ et } \vec{P} \text{ soient reliés par : } E^2 - P^2c^2 = m_0^2c^4 \quad (1.20)$$

On attribue au photon une masse au repos nulle. La relation (1.20) nous permet de déduire sa quantité de mouvement. On trouve donc :

$$P = \frac{E}{c} \quad (1.21)$$

avec $E = h\nu$

En utilisant (1.17), (1.18) et (1.20) on déduit la relation entre les masses au repos et en mouvement:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (1.22)$$

L'énergie cinétique de l'électron est la différence entre l'énergie totale en mouvement et celle au repos.

$$T = mc^2 - m_0c^2 \quad (1.23)$$

Le tableau suivant résume l'énergie et la quantité de mouvement de l'électron et du photon avant et après le choc :

		Avant le choc	Après le choc
Photon	Energie	$h\nu$	$h\nu'$
	Quantité de mouvement	$\frac{h\nu}{c}\vec{u}$	$\frac{h\nu'}{c}\vec{u}'$
Electron	Energie	m_0c^2	$mc^2 = \sqrt{P^2c^2 + (m_0c^2)^2}$
	Quantité de mouvement	$\vec{0}$	$\vec{P} = m\vec{v}$

Equations de conservation :

Conservation de l'énergie :

$$h\nu + m_0c^2 = h\nu' + \sqrt{P^2c^2 + m_0^2c^4} \quad (1.24)$$

Conservation de la quantité de mouvement selon l'axe Ox :

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c} \cos\theta + P \cos\varphi \quad (1.25)$$

Conservation de la quantité de mouvement selon l'axe Oz :

$$0 = \frac{h\nu'}{c} \cos\theta - P \sin\varphi \quad (1.26)$$

Nous avons 3 équations et 4 inconnues : ν', P, θ, φ . Nous allons éliminer P et φ

En combinant (1.25) et (1.26) On élimine φ et on obtient :

$$P^2 = \frac{h^2}{c^2} ((\nu - \nu' \cos\theta)^2 + \nu'^2 \sin^2 \theta) \quad (1.27)$$

L'équation (1.24) s'écrit :

$$P^2c^2 = (h(\nu - \nu') + m_0c^2)^2 - m_0^2c^4 \quad (1.28)$$

En combinant (1.27) et (1.28), on élimine P^2

$$h^2((\nu - \nu' \cos\theta)^2 + \nu'^2 \sin^2 \theta) = (h(\nu - \nu') + m_0c^2)^2 - m_0^2c^4$$

Et en simplifiant :

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0c} (1 - \cos\theta) \quad (1.29)$$

Qui est en parfait accord avec la loi expérimentale (1.16).

On pose : $\lambda_c = \frac{h}{m_0 c}$ (1.30)

λ_c s'appelle la longueur d'onde de Compton. Sa valeur numérique est $\lambda_c = 0.024 \text{ \AA}$

$\delta\lambda$ est une fonction croissante de θ car $\cos\theta$ est monotone sur l'intervalle $[0, \pi]$

Si $\theta = 0$, $\delta\lambda = 0$ cela veut dire qu'il n'y a pas de collision.

Si $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\delta\lambda = \lambda_c$

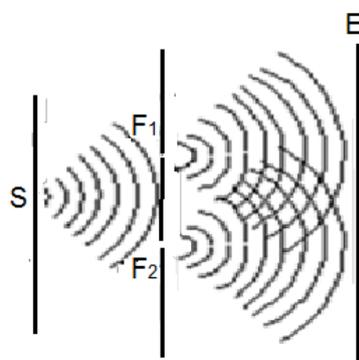
Si $\theta = \pi$, $\delta\lambda = 2\lambda_c$ c'est la rétrodiffusion. Dans ce cas l'énergie cinétique de l'électron après le choc est maximale.

1.4 Les fentes d'Young :

Dans les paragraphes précédents, nous avons vu qu'en considérant un aspect corpusculaire pour le rayonnement, on est arrivé à interpréter l'effet photoélectrique, l'effet Compton, et le comportement du corps noir. Devait-on alors rejeter la théorie classique ? Mais dans ce cas, comment expliquer les interférences lumineuses et la diffraction qui révèlent plutôt un aspect ondulatoire ? Il était donc impératif de trouver un moyen pour surmonter la contradiction apparente entre les deux descriptions.

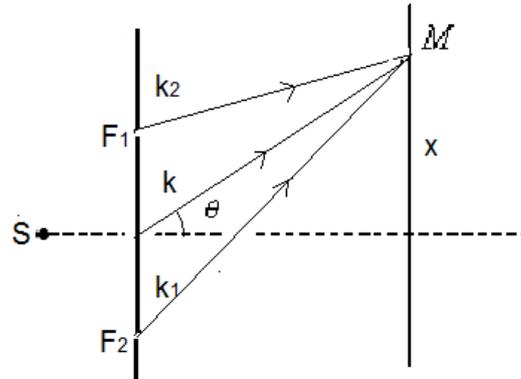
1.4.1. Expérience :

Une lumière monochromatique issue d'une source S passe par les fentes F_1 et F_2 . Les rayons issus de ces deux fentes tombent sur un écran d'observation situé à une distance D grande par rapport à la distance a entre F_1 et F_2 (Figure(1.7)).



Fig(1.7). Expérience des fentes d'Young

Dans le cas d'une onde lumineuse, les grandeurs qui oscillent sont les champs électrique et magnétique. Dans ce paragraphe, nous allons considérer comme fonction d'onde le champ électrique \vec{E} (Figure 1.7).



Fig(1.8) Calcul de l'intensité en un point M de l'écran

Le champ électrique s'écrit sous sa forme complexe :

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$$

Les champs issus des deux fentes F_1 et F_2 s'écrivent :

$$\vec{E}_1 = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1)} \quad (1.31)$$

$$\vec{E}_2 = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2)} \quad (1.32)$$

Et comme $D \gg a$, alors on fait l'approximation suivante :

$$\vec{k}_1 \approx \vec{k}_2 = \vec{k} \quad (1.33)$$

Le champ résultant au point M (voir fig(1.8)):

$$\begin{aligned} \vec{E}(M) &= \vec{E}_1(M) + \vec{E}_2(M) \\ &= \vec{E}_0 e^{-i\omega t} \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} \right) \end{aligned} \quad (1.34)$$

L'intensité lumineuse au point M est proportionnelle au carré du module du champ électrique en ce point,

$$I(M) \propto |\vec{E}(M)|^2 \quad (1.35)$$

$$\begin{aligned} |\vec{E}(M)|^2 &= \vec{E}(M) \vec{E}^*(M) \\ &= |E_0|^2 \left(e^{i\vec{k}\vec{r}_1} + e^{i\vec{k}\vec{r}_2} \right) \left(e^{-i\vec{k}\vec{r}_1} + e^{-i\vec{k}\vec{r}_2} \right) = 2|\vec{E}_0|^2 \left(1 + \cos \vec{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right) \end{aligned} \quad (1.36)$$

On pose $\delta = \vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$

$$|\vec{E}(M)|^2 = 2|\vec{E}_0|^2 (1 + \cos \delta) \quad (1.37)$$

D'après la figure(1.8),

$$\delta = \vec{k} \cdot \vec{a} = ka \cos(\theta) \quad (1.38)$$

$$= ka \frac{x}{D}$$

$$\cos(\delta) = -1 \Leftrightarrow ka \frac{x}{D} = (2n + 1)\pi$$

$$\cos(\delta) = 1 \Leftrightarrow ka \frac{x}{D} = 2n\pi$$

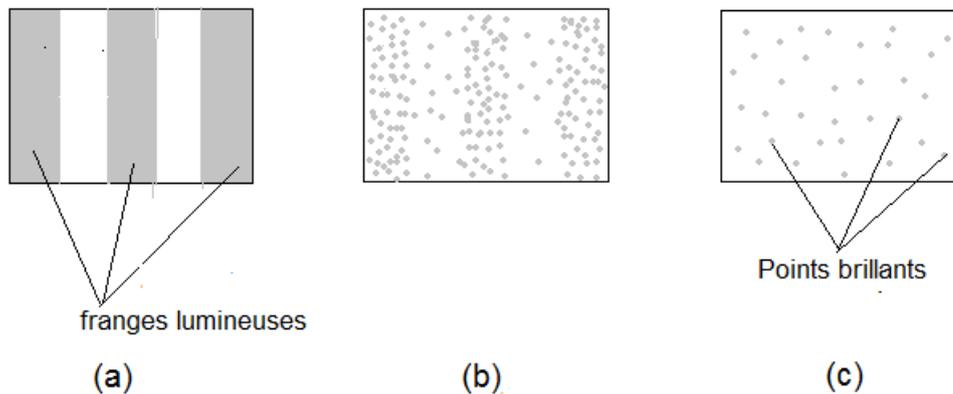
Un point situé à une distance x tel que $x = \frac{D}{ka} (2n + 1)\pi$ est obscur (eq(1.37)). On dit que les interférences sont destructives.

En revanche, un point situé à une distance x tel que $x = \frac{D}{ka} 2n\pi$ est extrêmement lumineux (Eq(1.37)). On dit que les interférences sont constructives.

Ainsi, la figure d'interférences s'explique en considérant que la lumière a un aspect ondulatoire. L'onde qui tombe en un point de l'écran est la superposition en ce point de l'onde issue de F_1 et de celle issue de F_2 .

1.4.2 Dualité onde-corpuscule :

Dans l'expérience des fentes d'Young, on décide de diminuer l'intensité de la lumière. On s'attend à ce que les franges de la figure((1.9),a) diminuent de façon continue jusqu'à disparaître. En fait, si l'intensité de la lumière diminue, on voit l'image d'interférences se transformer tel qu'il est indiqué sur la figure (fig(1.9),b) et lorsque l'intensité devient suffisamment faible, on voit sur la plaque des points brillants localisés qui remettent en évidence l'aspect corpusculaire de la lumière ! (fig(1.9),c) Si on augmente l'intensité, la figure d'interférence se redessine !(on retrouve l'image sur la figure(1.9),a)).



Fig(1.9) Evolution de la figure d'interférence en fonction de l'intensité de la lumière.

Cette expérience permet de déduire que la lumière se comporte comme un faisceau de corpuscules dans son interaction avec l'écran. Autrement dit, c'est un ensemble de photons qui arrivent sur l'écran en des points localisés. En augmentant l'intensité de la lumière, la figure d'interférences se forme petit à petit. Ceci veut dire que lorsque le nombre de photons qui arrivent sur l'écran augmente, ils ne tombent pas n'importe où, mais se distribuent selon une loi de probabilité qui correspond à la figure d'interférences. Les lieux des franges lumineuses (maximum d'intensité) sont les lieux où la probabilité de présence des photons sur l'écran est grande. Il se trouve que ce sont aussi les lieux où la grandeur du carré du module du champ électrique est grande et vice versa.

En 1924, Max Born a interprété $\vec{E}(\vec{r}, t)$ comme la fonction d'onde du photon. Cette fonction d'onde contient tous les informations sur ce photon. $|\vec{E}(\vec{r}, t)|^2$ représente la probabilité de présence du photon au point \vec{r} , à l'instant t .

On va conclure donc que la lumière se comporte à la fois comme une onde et un corpuscule. L'onde permet de calculer la densité de probabilité de présence du corpuscule en un point donné, en un temps donné. C'est ce qui caractérise 'un objet quantique'.

1.5 Stabilité de l'atome :

1.5.1 Modèle de Rutherford :

A la fin du XIX^e siècle, Rutherford avait imaginé un modèle planétaire pour l'atome dans lequel les électrons gravitent autour du noyau comme les planètes le font autour du soleil. Mais contrairement aux planètes, les électrons sont chargés. Or une charge électrique

accélérée émet un rayonnement électromagnétique. L'électron devrait donc perdre son énergie par rayonnement jusqu'à tomber sur le noyau.

Par ailleurs, d'après la mécanique classique, la fréquence du rayonnement émis devrait varier de façon continue avec le rayon de l'orbite lors de la chute de l'électron. On s'attend donc à observer un spectre continu. En réalité, on observe un spectre de raies.

La physique classique est donc incapable d'expliquer la stabilité des atomes, ni le spectre d'émission de ces atomes.

1.5.2 Modèle de Bohr :

Pour tenter d'expliquer la stabilité de l'atome ainsi que le spectre de raies, Bohr a posé les postulats suivants :

- 1) Les électrons ne peuvent occuper que des orbites dites « stationnaires » sur lesquels ils ne peuvent ni émettre ni absorber de l'énergie.
- 2) Les seules orbites stationnaires sont celles pour dans lesquelles le moment cinétique est quantifié. Autrement dit, celles qui vérifient :

$$mvr = n\hbar \quad (1.39)$$

Avec : $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

m est la masse de l'électron, v sa vitesse, r est le rayon de son orbite et n est un entier naturel.

- 3) L'émission (ou l'absorption) est déterminée uniquement par le passage de l'électron d'une orbite d'énergie E_n à une autre d'énergie plus petite (ou plus grande) E_m .

Ce modèle de l'atome proposé par Bohr est basé sur les lois de la mécanique classique auxquelles il a ajouté un principe de quantification. Il aboutit à la quantification des rayons et de l'énergie atomique. Il explique avec succès les spectres atomiques.

1.6 Aspect ondulatoire pour la matière :

1.6.1 Postulat de De Broglie :

Rappelons-nous que la lumière qu'on croyait tantôt ondulatoire, tantôt corpusculaire, s'est avérée possédant un double aspect.

En 1924, Louis De Broglie postule théoriquement l'existence d'un aspect ondulatoire pour la matière. Il associe à toute particule de quantité de mouvement \vec{p} , une onde de longueur d'onde λ telle que,

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (1.42)$$

En 1927, deux étudiants, Davisson et Germer ont confirmé expérimentalement cette hypothèse. Ils ont réalisé une diffraction des électrons par un cristal. Ils ont utilisé un faisceau d'électrons dont l'énergie est 54eV . Le paramètre du cristal est de $2,55\text{Å}$. Le premier maximum est observé dans un angle de 19° .

En admettant que l'électron est une onde, on calcule sa longueur d'onde en utilisant la loi de Bragg qui est vraie pour n'importe quelle onde :

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

On trouve alors :

$$\lambda = 2.2,55. \sin(19^\circ) = 1,67 \text{Å}.$$

On a pris $n = 1$ car il s'agit du premier maximum.

En utilisant la loi de De Broglie (1.42),

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{hc}{\sqrt{2mc^2E}} = \frac{12400}{\sqrt{0,511.54.10^3}} = 1,67 \text{Å}$$

Nous avons utilisé $hc = 12400 \text{ eV} \cdot \text{Å}$ et la masse au repos de l'électron $mc^2 = 0,511\text{MeV}$

On trouve la même valeur pour λ que celle calculée par la loi de Bragg. Ainsi, Davisson et Germer ont validé la loi de De Broglie.

On est amené à déduire que comme la lumière, la matière aussi a un double aspect. Elle est à la fois ondulatoire et corpusculaire.

1.6.2 Fonction d'onde pour une particule matérielle :

Comme pour la lumière, on associe une fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ à toute particule matérielle. Cette fonction d'onde contient toutes les informations sur la particule.

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

On écrit :

$$\frac{dP}{dV} = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \Rightarrow dP = |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV$$

dP représente la probabilité de trouver la particule dans un élément de volume dV .

Il est commode de normaliser la probabilité totale (on sait que la particule se trouve quelque part), et on écrit :

$$P = \int_{\text{tout l'espace}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1 \quad (1.43)$$

On dit que $\psi(\vec{r}, t)$ est de carré sommable.

Récapitulons : Nous avons vu que comme la lumière, la matière a un comportement qui paraît contradictoire. Il est parfois ondulatoire et parfois corpusculaire. La mécanique quantique a résolu cette contradiction apparente en expliquant qu'une particule n'est ni une onde ni un corpuscule, mais peut adopter l'un ou l'autre des comportements selon les conditions dans lesquelles elle se trouve. Si la longueur d'onde est négligeable par rapport aux dimensions mises en jeu, la particule se comporte comme un corpuscule et les lois de Newton décrivent parfaitement son comportement. Dans le cas contraire, comme par exemple dans l'expérience de Davisson et Germer où la longueur d'onde est du même ordre de grandeur que le paramètre du réseau, la particule adopte le comportement ondulatoire et la mécanique classique de Newton ne fonctionne plus.

1.6.3 Equation de Schrödinger :

Pour la lumière, nous avons une équation qui régit la propagation des ondes. Il s'agit de l'équation d'Alembert. Pour la matière, Schrödinger a postulé qu'une fonction d'onde associée à une particule matérielle $\psi(\vec{r}, t)$ doit obéir à l'équation d'onde suivante :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right) \psi(\vec{r}, t) \quad (1.44)$$

Cette équation s'appelle équation de Schrödinger. C'est une équation linéaire aux dérivées partielles. L'opérateur qui apparaît dans le deuxième terme est l'hamiltonien d'une particule de masse m plongée dans un potentiel $V(\vec{r}, t)$. On écrit :

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \quad (1.45)$$

Au chapitre II, nous allons utiliser l'équation de Schrödinger pour comprendre le comportement d'une particule quantique dans des situations très simples.

1.7 Principes d'incertitude de Heisenberg :

Dans l'univers macroscopique, on peut toujours mesurer à la fois la position et l'impulsion d'une particule avec autant de précision que les instruments de mesure le permettent. C'est ce qui permet de déterminer sa trajectoire. En mécanique quantique ce n'est plus possible,

et par conséquent la notion de trajectoire perd son sens physique. C'est le principe d'incertitude de Heisenberg qui s'énonce pour la variable x de la façon suivante:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.46)$$

Ici, Δx représente l'incertitude sur la mesure de x et Δp_x l'incertitude sur la mesure de p_x .

Ce principe s'énonce de la même manière pour les variables y et z .

Pour les systèmes classiques, les incertitudes dues au principe de Heisenberg sont insignifiantes devant les dimensions mises en jeu. Ce n'est pas le cas pour les systèmes quantiques.

Il en découle que si une particule quantique est confinée dans une région finie de l'espace, de largeur a par exemple, alors l'incertitude sur sa position sera au plus égale à a et donc :

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2a}$$

Cette particule ne peut donc jamais être au repos. Sa plus basse énergie n'est pas nulle et s'appelle 'énergie de localisation', ou 'énergie du point zéro'. Cette énergie du point zéro a de l'importance pour un système quantique, mais elle est insignifiante pour un système classique.

Il existe une autre relation d'incertitude entre le temps et l'énergie qui se formule de la façon suivante :

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.47)$$

Nous reviendrons sur cette relation au chapitre IV. En mécanique quantique les quantités x , p_x ou E sont mesurables alors que le temps est un paramètre (par exemple, on mesure x à l'instant t). Pour cela, cette relation d'incertitude s'interprète de la façon suivante :

ΔE est l'incertitude sur l'énergie d'un système et Δt est la durée de vie de ce système. Par exemple, si l'énergie d'un système est parfaitement définie ($\Delta E = 0$), alors sa durée de vie est infinie ($\Delta t = \infty$). On dit de ce système qu'il est stationnaire. Par contre, s'il a une durée de vie finie, comme c'est le cas pour un atome excité, alors son énergie est connue avec une incertitude égale à :

$$\Delta E = \frac{\hbar}{2\Delta t}$$

Cet atome revient spontanément à son état fondamental après un temps Δt . Il émet une raie qui a un élargissement inévitable dû à ΔE , qu'on appelle 'élargissement naturel'.