Chapitre III: Introduction à la mécanique quantique

II.1. Introduction

Au cours du 20ème siècle, une grande question imposée qui concerne la nature essentielle du monde matériel. Les physiciens ont usé d'astuces formelles pour élaborer la théorie quantique et faire en sorte que le monde particulaire observé et théorisé puisse rester proche de celui décrit par la physique classique

La nouvelle position du problème de la description des phénomènes physiques, dont le point de départ est l'idée de relativité par rapport aux moyens d'observation, exige un formalisme mathématique plus développe et plus complique que celui de la physique classique: au lieu des nombres dans cette théorie classique, le formalisme quantique introduit des opérateurs et d'autres notions mathématiques nécessaires pour calculer les répartitions de probabilités.

II.2. Formalisme mathématique de la mécanique quantique

Le monde quantique est représenté par un formalisme utilisant des symboles mathématiques parmi lesquels certains sont dénués de rapports avec le monde réel spatiotemporel qui tombe sous les sens tout en étant mesurable par la mécanique rationnelle. Pour un système physique donné, ce formalisme mathématique permet de trouver la fonction d'onde qui correspond à un résultat donné de l'expérience initiale.

II.2.1. Principe de correspondance

En mécanique classique, l'état du système est représenté par les grandeurs physiques: position $\vec{r}$ et impulsion $\vec{p}$. Ainsi, qu'il suffit de mesurer ces deux grandeurs physiques et l'état du système est totalement déterminé. Pour un système quantique, il est nécessaire de distinguer les grandeurs physiques observables de l'état du système proprement dit. C'est le cas notamment de la description d'une particule comme une somme de vecteurs d'états, lesquels sont des nombres complexes.

Au cours du 20ème les physiciens ont usé d'astuces formelles pour élaborer la théorie quantique et faire en sorte que le monde particulaire observé et théorisé puisse rester proche de celui décrit par la physique classique. Bohr était le premier qui donne en quelque sorte les règles pour construire des équations quantiques à partir d'équation classique, il y vit un guide sûr pour construire de nouvelles théories.

Notamment, il crut que l'application du principe à un Hamiltonien classique produirait automatiquement le bon Hamiltonien de la théorie quantique.

En généralement, Le principe de correspondance fonctionne sur au moins deux plans essentiels. Celui des formalismes avec la recherche d'analogies formelles reliant des mathématiques quantiques avec les théories classiques. Puis le plan des observations où il s'agit d'établir des connexions entre des prédictions quantiques et des phénomènes du monde macroscopique.

II.2.2. Equation d'onde

En mécanique quantique, la fonction d'onde n'est pas un champ réel de type classique, mais elle représente le virtuellement possible, c-à-d pour qu'elle permette de mesurer la position d'une particule ou bien son impulsion, en effectuant un grand nombre de mesures. Ainsi, si la valeur obtenue à l'issue de chaque mesure individuelle n'est pas connue, il est possible de faire des prévisions probabilistes sur les résultats de mesure. Donc, Un état détermine la distribution de probabilité associée à chacune des observables du système.

En peut dire, comme la fonction d'onde dans le système classique donne une description complète d'un état de ce système physique, dans la mécanique quantique l'état d'un système est caractérisé par les réactions virtuellement possibles du système avec les appareils de mesure.

Le formalisme de la mécanique quantique permet de trouver, pour un système physique donné, la fonction d'onde qui correspond à un résultat donne de l'expérience initiale. En 1924, de Broglie a donné une exposition claire de ce formalisme, il donne des relations linéaires pour une fonction d'onde de matière:

$$E = \hbar\omega; \qquad p = \hbar k \tag{II.1}$$

Ces relations permettent de rapporter l'état d'une particule d'impulsion et d'énergie, à une fonction d'onde ψ (x, y, z, t) de forme suivant:

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(xp_x + yp_y + zp_z - Et)} \tag{II.2}$$

Cette forme de la fonction d'onde représente les possibilités telles que la mesure de l'impulsion doit nécessairement donner sa valeur dans la relation (II.1).

Ainsi que la probabilité dans l’espace de l’impulsion est proportionnelle au carre de l’amplitude de la fonction ψ sous la forme d’une somme des ondes planes du type (II.2).

En peut dire que la répartition des probabilités pour les coordonnées et les composantes de l’impulsion, satisfait toujours aux inégalités de Heisenberg (I.3) quelle que soit la fonction d’onde ψ.

II.3. Evolution du système

La fonction d’onde (II.2) dépend du temps par le terme $e^{-\frac{i}{\hbar}Et)}$; où E l’énergie totale de la particule qui définie par:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \qquad \text{(II.3)}$$

où m est la masse de la particule.

Alors, la fonction d’onde (II.2) satisfait à l’équation d’onde suivante:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad \text{(II.4)}$$

et

$$\Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \qquad \text{(II.5)}$$

L’équation (II.4) représente l’évolution spatiale et temporelle de la fonction d’onde d’une particule libre.

Pour une particule soumise à des forces extérieures, cette équation doit être modifiée par l’énergie totale qui est égale à la somme de son énergie cinétique et de son énergie potentielle sous la forme suivante:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\,\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad \text{(II.6)}$$

Nous arrivons alors à une équation nommée l’équation de Schrödinger dépendante du temps, leurs solutions sous forme suivante:

$$\psi(x,y,z,t) = \psi_E(x,y,z)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \qquad \text{(II.7)}$$

Ces solutions se sont les états stationnaires du système.

II.3.1. Densité de probabilité

Pour le cas plus simple d'une particule dans l'espace à une dimension, l'équation (II.6) devient:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\,\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} \qquad \text{(II.6)}$$

La densité de probabilité de trouver la particule x à l'instant t est donnée par Max Born (1929):

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