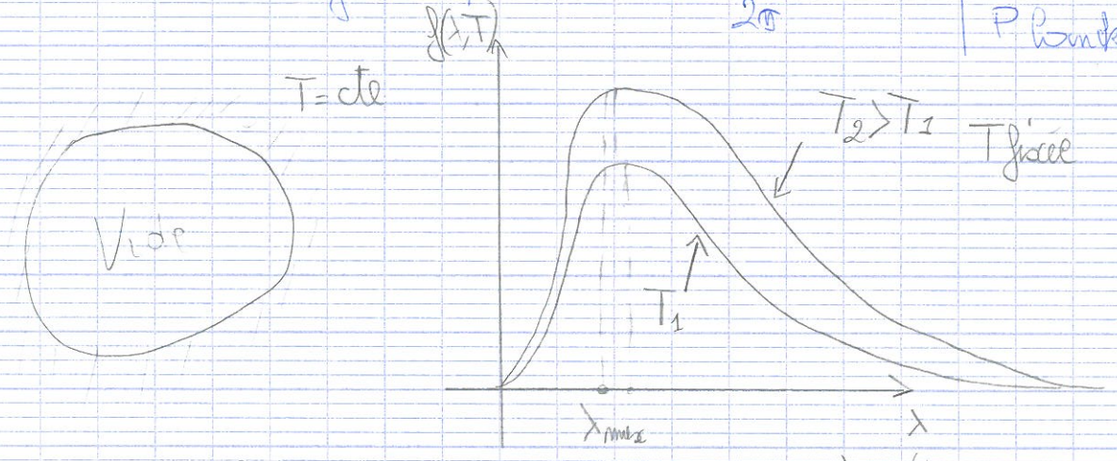
Mécanique quantique ondulatoire

Constante de Planck (1900) → Nobel 1918

$h = 6{,}626\,070\,15 \cdot 10^{-35}$ J·s

sert de définition pour SI $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ cste de Dirac / Planck réduite $\sim 1{,}05\,10^{-34}$ J·s



contribution de $\lambda, \lambda + d\lambda$ $\quad du = d\lambda\, f(\lambda, T)$ $\quad$ (Wien $\sim 3000\ \mu m K$

onde radio $\quad$ Wifan...

I Fonction d'onde, Équation de Schrödinger

1) Dualité onde - corpuscule

a) Cas de la lumière :

Effet photoélectrique 1905 Einstein → 1921

19e siècle : la lumière est une onde électromagnétique

Einstein : transport de l'énergie se fait par paquets et pour une onde de fréquence ν : $E_{1\,paquet} = h\nu$ (Planck-Einstein)

mot précis : quantum d'énergie $h\nu = \hbar\omega$, $\nu = \frac{\omega}{2\pi}$

→ particule associée à l'onde : photon → doit être de vitesse c, avec $E = h\nu$

→ $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$ relativité : $v = c \Leftrightarrow m = 0$: $p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$

↑ quidm

b) Generalisation à toutes les particules

Louis de Broglie 1924 (Prix nobel 1929)

Etat (à toute particule d'énergie E et de qdm p on peut associer une onde harmonique telle que $\lambda = \frac{h}{p}$ et $\omega = \frac{E}{\hbar}$ | $\nu = \frac{E}{h}$

L'onde s'écrit $\Psi_{dB} = \Psi_0 e^{i(kx - \omega t)}$, $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{h} p = \frac{p}{\hbar}$

$= \Psi_0 e^{i\left(\frac{px}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar}\right)}$

c) Ce qu'il faut ajouter pour avoir une description physique cohérente

* Nature de l'onde? signification physique de Ψ?

* Equations indiquant le comportement de Ψ? (equivalent pour Ψ avec eq de Maxwell)

2) Interpretation de Ψ Born 1926 (Nobel 1324)

* Par essence Ψ est complexe

* Ψ pour etudier une particule, on etudie $\Psi(M,t)$. La probabilité de trouver la probabilité de trouver la particule dans un volume $d\tau$ autour du point M est:



$$dp = \|\Psi(M)\|^2 d\tau$$

$\frac{dp}{d\tau} = \|\Psi(M)\|^2 \rightarrow$ densité volumique de proba.

Ψ: amplitude de probabilité

3) Quelle serait l'equation d'evolution pour l'onde de Broglie?

(Cas d'une particule libre non relativiste)

$E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m}$, $p = mv$

$\frac{\partial \Psi_{dB}}{\partial t} = -i \frac{E}{\hbar} \Psi_{dB}$ | $\frac{\partial \Psi_{dB}}{\partial x} = \frac{ip}{\hbar} \Psi_{dB}$

$\rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi_{as} \longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2m}\psi = E\psi$

A Equation de Schrödinger 1926 → Nobel 1933

H particule élémentaire non relativiste sans spin
système qui, en mécanique classique serait décrit par une force dérivant d'une énergie potentielle $V(M,t)$
(vocabulaire classique)

→ en quantique : particule soumise à un potentiel $V(M,t)$

Equation de Schrödinger

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

H opérateur $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\times$ hamiltonien

B Les états stationnaires solution de l'équation de Schrödinger :

H Particule soumise à $V(M)$

a Séparation des variables pour trouver les solutions :

On cherche une sol : $\Psi(M,t) = \varphi(M)\, e^{-i\omega t}$ ← convention incontournable

⚠ attention : signe − devant ωt obligatoire

correspond à $E = \hbar\omega$

On remplace : $\hbar\omega\varphi e^{-i\omega t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi\, e^{-i\omega t} + V\varphi e^{-i\omega t}$

$$\rightarrow \boxed{E\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi + V\varphi}$$ → aucun sens si V dépend de t

opérateur hamiltonien appliqué à φ

→ $E\varphi = H(\varphi)$ φ est vecteur propre de H

b Interprétation :

On est amené à résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps.

$$E\varphi = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\varphi + V\varphi$$

dans laquelle E est une valeur propre de l'opérateur hamiltonien et φ un vecteur propre

E sera l'énergie de l'état étudié

c) Pourquoi utiliser le terme état stationnaire ?

$\frac{dP}{d\tau} = |\psi|^2 = |\varphi|^2 = |\varphi(M)|^2$

onde pendant dt → état stationnaire

II Etude d'une particule libre $V=0$

→ en dimension 1 | Schrödinger $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$

| état stationnaire : $E\varphi = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2}$

① Solution en utilisant les ondes de de Broglie

a) Etats stationnaires d'une particule libre :

$\psi = \varphi(x)\, e^{-i\omega t}$

▶ $E = \hbar\omega$, $E\varphi = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2}$, $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -k^2\varphi$ $\quad (\text{H} : E>0)$

$\varphi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \rightarrow \psi = Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{i(-kx-\omega t)}$

$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}} = \frac{p}{\hbar}$, $E = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \psi = \underbrace{Ae^{i\left(\frac{px}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar}\right)}}_{\text{onde de B à prop. } x} + \underbrace{Be^{i\left(-\frac{px}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar}\right)}}_{\text{... } x}$

Bon candidat pour décrire le mouvement d'une particule

b) Vitesse de phase de l'onde

$v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p_{\text{particule}}}{2m} = \frac{m\, v_{\text{classique de la particule}}}{2m} = \frac{v_{\text{classique de la particule}}}{2}$

c) Si on forme un paquet d'ondes :

$\rightarrow v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar 2k}{2m} = v_{classique\ de\ la\ particule}$: OK

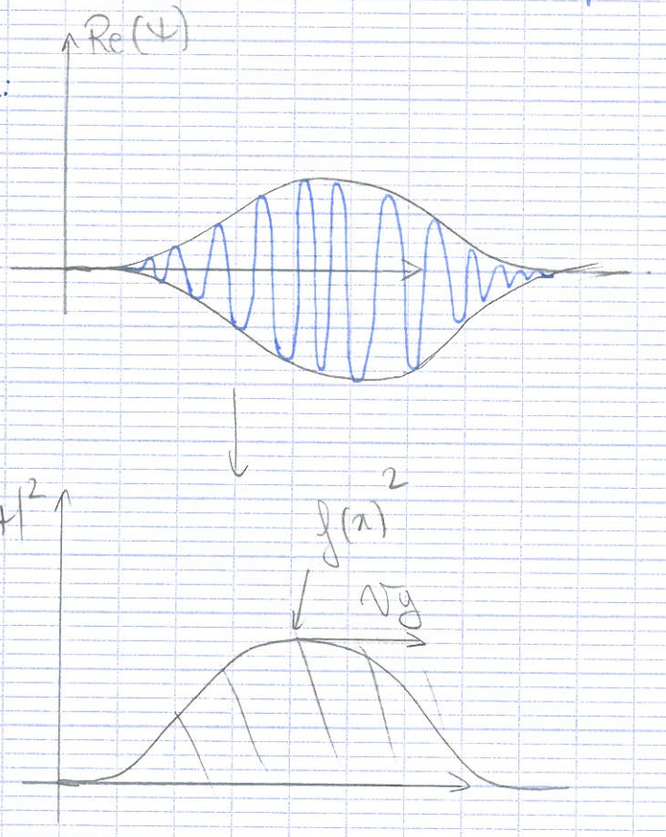
d) Normalisation de la fonction d'onde

Probabilité de présence $\frac{dP}{dx} = |\Psi|^2$

doit respecter $\int_{-\infty}^{+\infty} dp = 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = 1$ or $\Psi = A\, e^{i\left(\frac{px}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar}\right)}$

$|\Psi|^2 = |A|^2 =$ cte donc Ψ_{dB} est non normalisable : remède : paquet d'onde

Pour un paquet d'onde :



2) Paquet d'onde de Broglie

a) Transformée de Fourier

Soit $f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$, $x \longmapsto f(x)$ $\qquad \hat{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} f(x)\, dx$

En général $\int_{-\infty}^{+\infty} |f|^2 dx$ existe $\qquad \hat{f} : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$, $k \longmapsto \hat{f}(k)$: transformée de Fourier de f

b) Propriétés

inversion $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \hat{f}(k)\, dk$: $f = F^{-1}(\hat{f})$

↳ transformée de Fourier inverse

* Parseval : $\int_{-\infty}^{+\infty} |\hat{f}(k)|^2 dk = \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx$

c) Écriture d'un paquet d'ondes de de Broglie

$\Psi_{dB} = \Psi_0 e^{i(kx-\omega t)}$ → particule ayant une E déterminée et p aussi

$p = \hbar k = h/\lambda$

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

particule libre (pas d'E_{pot}) : $E = \frac{p^2}{2m} \longrightarrow \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} = \omega(k)$

↳ Relation de dispersion

Transformée : $\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0(k)\, e^{i(kx-\omega(k)t)}\, dk$ → Superposition d'états où E et p sont différents

↳ Somme d'ondes de deBroglie

↳ paquet d'ondes de Broglie

$\Psi_0(k)\, e^{-\omega(k)t}$: Transformée de Fourier de $\Psi(x,t)$ (où t fixé) noté $\hat{\Psi}(k,t)$.

d) Interprétation probabiliste de $\hat{\Psi}(k,t)$ ou de $\Psi_0(k)$

(H) $\Psi(x,t)$ est normalisée

$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = 1$: condition pour que Ψ représente bien une particule

$dP = |\Psi|^2 dx \Longrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} |\hat{\Psi}(k)|^2 dk = 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_0(k)|^2 dk$

↳ Proba de présence entre x et x+dx

Interprétation : la probabilité, en mesurant la quantité de mouvement, de trouver k à dk près vaut $|\Psi_0(k)|^2 dk$

$$dP_{[k,k+dk]} = |\Psi_0(k)|^2 dk$$

d) Conclusion

Une particule pourrait être représentée par un paquet d'ondes de de Broglie mais toute grandeur mécanique telle que position ou quantité de mvt doit faire l'objet d'une étude probabiliste

3) Inégalité de Heisenberg :

a) grandeur statistique associée à la position et à la quantité de mouvement

$|\Psi|^2$ densité de probabilité de présence

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi|^2 dx \text{ : espérance ;} \qquad \langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\Psi|^2 dx$$

variance $V(x) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$

écart-type $\Delta x = \sqrt{V(x)}$

Remarque : formules valables si Ψ est normalisé, si Ψ non normalisé :

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi|^2 dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx}$$

De même $|\hat{\Psi}(k)|^2$ densité de proba pour k

k variable aléatoire $\langle k \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} k |\hat{\Psi}(k)|^2 dk$, $\langle k^2 \rangle$, $V(k)$, Δk

b) Propriété mathématique de la transformée de Fourier

Résultat purement mathématique:

$$\boxed{\Delta k \cdot \Delta x \geqslant \frac{1}{2}}$$

c) Inégalité de Heisenberg:

* En dimension 1 : $p_x = k\hbar$

$$\boxed{\Delta x \, \Delta p_x \geqslant \frac{\hbar}{2}} \xrightarrow{\text{dim 3}} \Delta y \, \Delta p_y \geqslant \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z \, \Delta p_z \geqslant \frac{\hbar}{2}$$

Δx : précision de la détermination de la position

Δp_x : Δ de p_x

→ On ne peut pas mesurer avec une précision arbitraire à la fois x et p_x

→ x et p_x sont des grandeurs conjuguées

d) Exemple numérique:

$\hbar \sim 1{,}05 \cdot 10^{-34}$ SI

▷ à l'échelle macroscopique : $p_x = m v_x$, $m = 1$ kg

$\Delta x \, \Delta v_x \geqslant 10^{-34} \longrightarrow \Delta x \sim 10^{-17}$, $\Delta v_x \sim 10^{-17}$: pratiquement nuls.

▷ à l'échelle mésoscopique : distances typiques 10^{-6} m



← volume $\sim 10^{-18}$ m^3

eau : 1 m^3 ⟺ 1000 kg) → 10^{-15} kg

→ $\Delta x \, \Delta v_x \geq 10^{-13} \, m^2 s^{-1}$, par exemple $\Delta x \sim 10^{-9} \, m$

$\Delta v_x \sim 10^{-9} \, m \, s^{-1}$

l'inégalité n'est pas limitative

▷ à l'échelle nanométrique (microscopique) dimension $\sim 10^{-9} m$

→ $m \sim 10^{-24} kg$, $\Delta x \, \Delta v_x \geq 10^{-10} \, m^2 s^{-1}$

↓

ex: $\Delta x \sim 10^{-12} \rightarrow \Delta v_x \geq 100 \, m \, s^{-1}$!

- précision inexistante

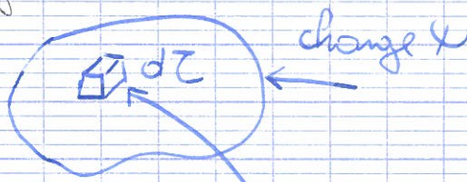
4) Densité de courant de probabilité :

a) À connaître dans le cadre du programme

Analogie avec la charge électrique

▷ mécanique quantique $dp = |\psi|^2 d\tau$

↳ particule chargée Q



$dq = dp \times Q = Q|\psi|^2 d\tau$

$\leftrightarrow \rho = Q|\psi|^2$

densité volumique de probabilité

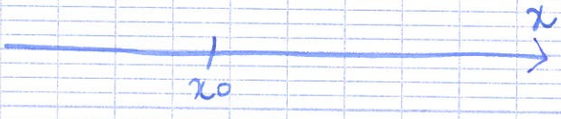
Analogie

Charge électrique	Probabilité
densité ρ	densité volumique $\lvert\psi\rvert^2$
$\vec{j} = \rho \vec{v}$	$\vec{J} = \lvert\psi\rvert^2 \vec{v}$ / $\hbar$? → quelle vitesse
	↳ $\vec{J} = \frac{\hbar k}{m} \lvert\psi\rvert^2$: bon candidat

→ Pour une onde plane progressive de de Broglie (particule libre), on peut définir, en dimension 1, une densité de probabilité $J = \frac{\hbar k}{m} |\psi|^2$

de courant

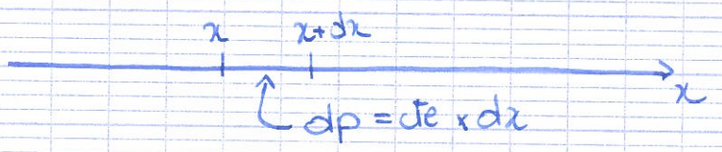
dont la signification physique est :



$J(x_0)$ est la variation par unité de temps de la probabilité de présence de la particule pour $x > x_0$

b) Interpretation d'une onde de de Broglie pure :

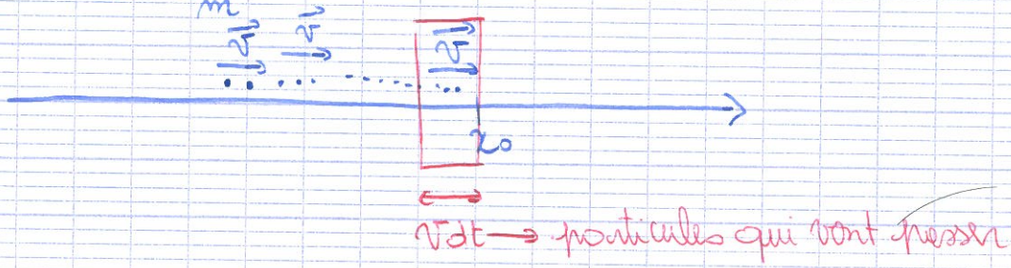
▷ $\Psi_{dB} = \Psi_0 e^{i(kx-\omega t)}$ → non normalisable $|\Psi_{dB}|^2 = dt$



ensemble de particules sur l'axe, densité linéique n → sur dx ; $n\,dx$ particules

$\Psi = \sqrt{n}\, e^{i(kx-\omega t)}$ → particules de quantité de mouvement $p = \hbar k$,

de vitesse $\frac{\hbar k}{m}$



→ débit en nombre de particules :

▷ pendant dt : $dN = n \times v\,dt$ → débit $\frac{dN}{dt} = nv = \frac{\hbar k}{m}|\Psi|^2 = J$

c) Hors programme : généralisation :

▷ Equation générale de Schrödinger en dim 1 ($V \neq 0$)

(1) ▷ $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \times \overline{\Psi}$

On prend le conjugué des 2 côtés : $-i\hbar \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial x^2} + V\bar{\Psi}$ $\times(-\Psi)$ ②

① + ② : $i\hbar \underbrace{\left(\bar{\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t}\right)}_{\frac{\partial \Psi\bar{\Psi}}{\partial t}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\left[\bar{\Psi}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial x^2}\right]}_{\frac{\partial}{\partial x}\left(\bar{\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x}\right)\text{ presque immédiat}} + 0$

On obtient $\frac{\partial \Psi\bar{\Psi}}{\partial t} - \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\bar{\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x}\right) = 0$

$$\longrightarrow \quad \frac{\partial \Psi\bar{\Psi}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left(\bar{\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)\right) = 0$$

$\Psi\bar{\Psi}$: densité volumique de probabilité

L'équation peut être vue comme : $\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \mathrm{div}\,\vec{\delta}_A = \alpha$, A = probabilité

Impossible de créer de proba : $\int \text{proba} = 1 \Rightarrow \alpha = 0$

On pose donc $J_x = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left(\bar{\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)$

Généralisation : $\vec{J} = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left(\bar{\Psi}\,\mathrm{grad}\,\Psi\right)$

Equation bilan locale de probabilité

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \mathrm{div}\,\vec{J} = 0$$

▷ Particule libre : onde de de Broglie progressive : $\Psi = \Psi_0 e^{i(kx-\omega t)}$

$$\mathrm{Im}\left(ik\,\Psi_0\bar{\Psi}_0\, e^{-i(kx-\omega t)}\, e^{i(kx-\omega t)}\right) = k\,\Psi_0\bar{\Psi}_0$$

La formule s'écrit $J_x = \frac{\hbar}{m}k|\Psi_0|^2 = \frac{\hbar k}{m}|\Psi|^2$

④ Analyse dimentionnelle (fonctions d'onde et densité de courant de probabilité)

* dimension 1 : $dP_{[x,x+dx]} = |\Psi|^2 dx$, $[\Psi] = L^{-1/2}$

$$J = \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im}\left(\bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) \rightarrow \underbrace{\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t}}_{L^{-1}\cdot T^{-1}} + \underbrace{\frac{\partial J}{\partial x}}_{\frac{[J]}{L}} = 0$$

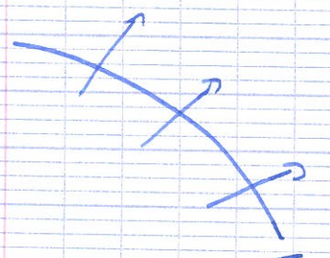
↳ débit en nombre de particules

$\rightarrow [J] = T^{-1}$ → débit

* dimension 3 : $dP_{\text{dans } d\tau} = |\Psi_3^2| \, d\tau \rightarrow [\Psi_3] = L^{-\frac{3}{2}}$

$$\vec{J}_3 = \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im}\left(\bar{\Psi}_3 \overrightarrow{\mathrm{grad}}\, \Psi_3\right) \rightarrow [J_3] = L^{-2} T^{-1}$$

Débit de probabilité à travers Σ $= \iint_\Sigma \vec{J}_3 \, d\vec{\Sigma}$ ← dim T^{-1}

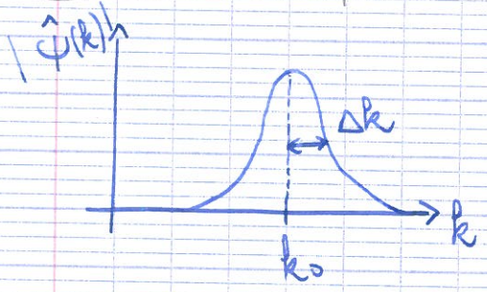


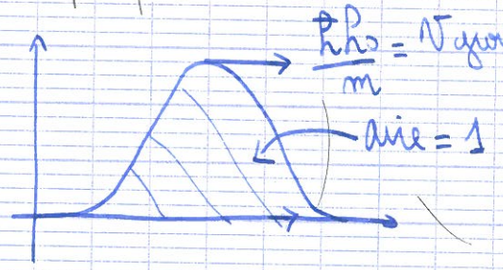
(ex : $J_1 = J_3 S$)

△ dim de J diffère selon la dimension

⑤ Complément sur le comportement d'un paquet d'onde

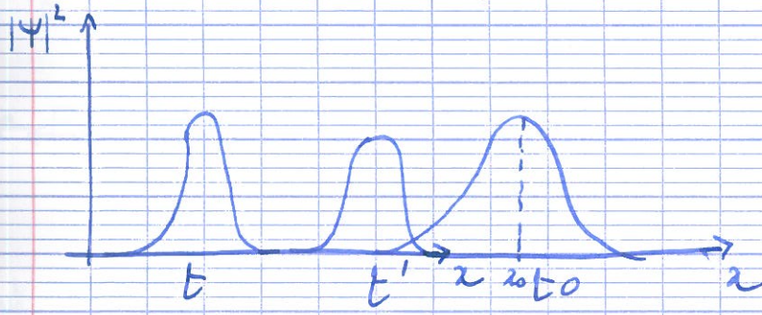
⑧ Evolution temporelle d'un paquet d'onde :





Voir polycopié

b) Relation de Heisenberg relative à l'énergie et à la date



On choisit x_0, à quelle date la particule passe-t-elle en x_0 ?

$$\Delta t_{\substack{\text{imprécision} \\ \text{sur la date} \\ \text{de passage}}} = \frac{\Delta x}{v_g} \geqslant \frac{\hbar}{2\Delta p v_g} = \frac{\hbar}{2\hbar \Delta k u}$$

avec $u = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k_0}$

$$d\omega = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k_0} \times dk, \quad \Delta\omega = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k_0} \cdot \Delta k$$

$$\rightarrow \Delta t_{\substack{\text{imprécision} \\ \text{sur la date} \\ \text{de passage}}} \geqslant \frac{\hbar}{2\hbar\Delta\omega} = \frac{\hbar}{2\Delta E} \Rightarrow \boxed{\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Inégalité de Heisenberg relative à l'énergie

III Etats stationnaires d'une particule soumise à un potentiel non uniforme :

1) Présentation

* Etude en dimension 1 :

▷ Energie potentielle de potentiel $V(x)$

▷ Recherche d'état stationnaire : $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi$

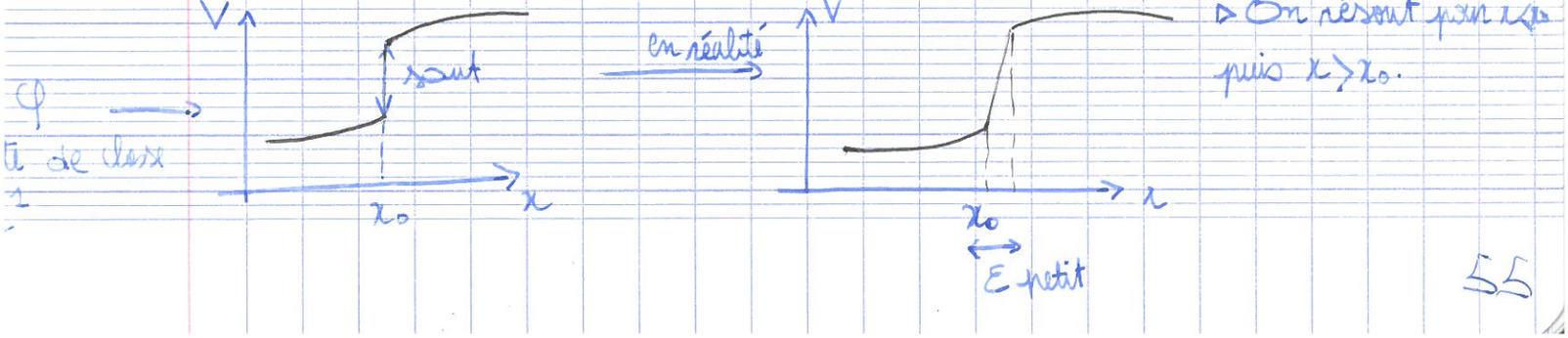
On cherche une solution $\Psi(x,t) = \varphi(x)\, e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \rightarrow E$ fixée

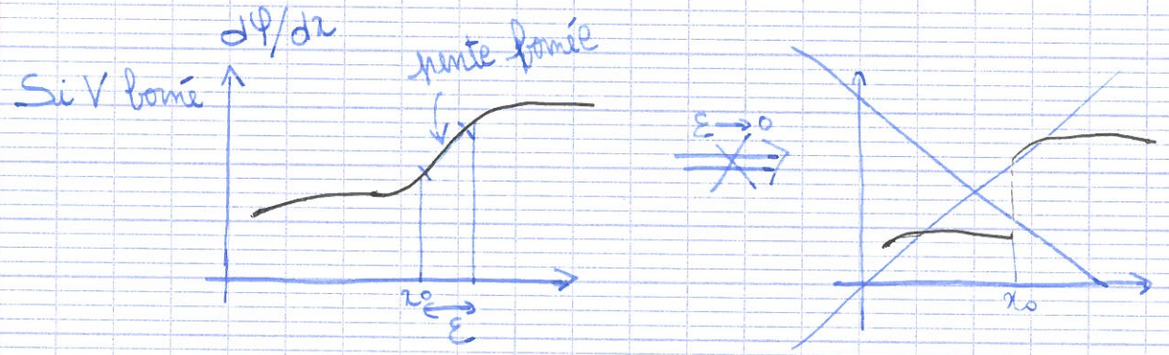
↳ base de l'ev des solutions

On remplace $E\varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} + V(x)\varphi(x)$

* Si $V(x)$ est continu $\rightarrow \varphi(x) \in \mathcal{C}^2$

* Si V présente des points de discontinuité isolés mais reste bornée

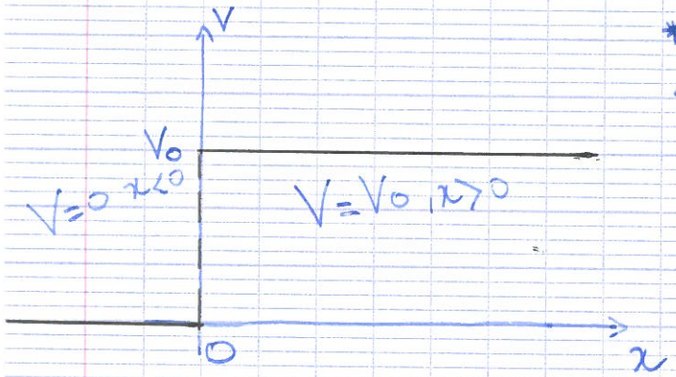




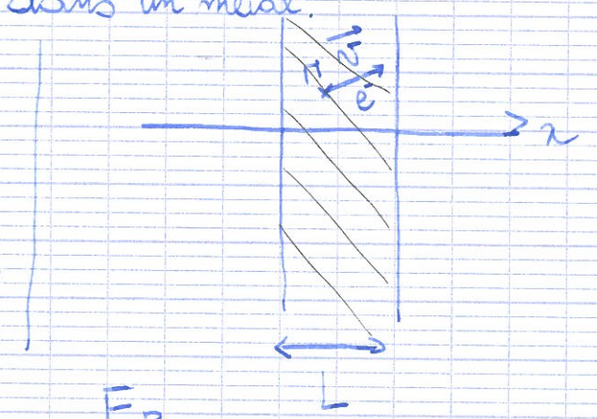
▷ Un saut de potentiel n'empêche pas ψ d'être $\mathcal{C}^1$.

② Exemple 1 : la marche de potentiel.

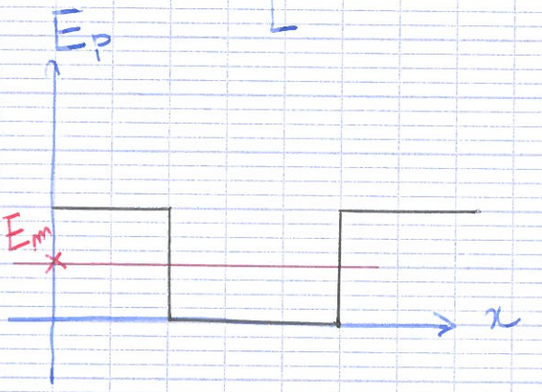
ⓐ Problème étudié :



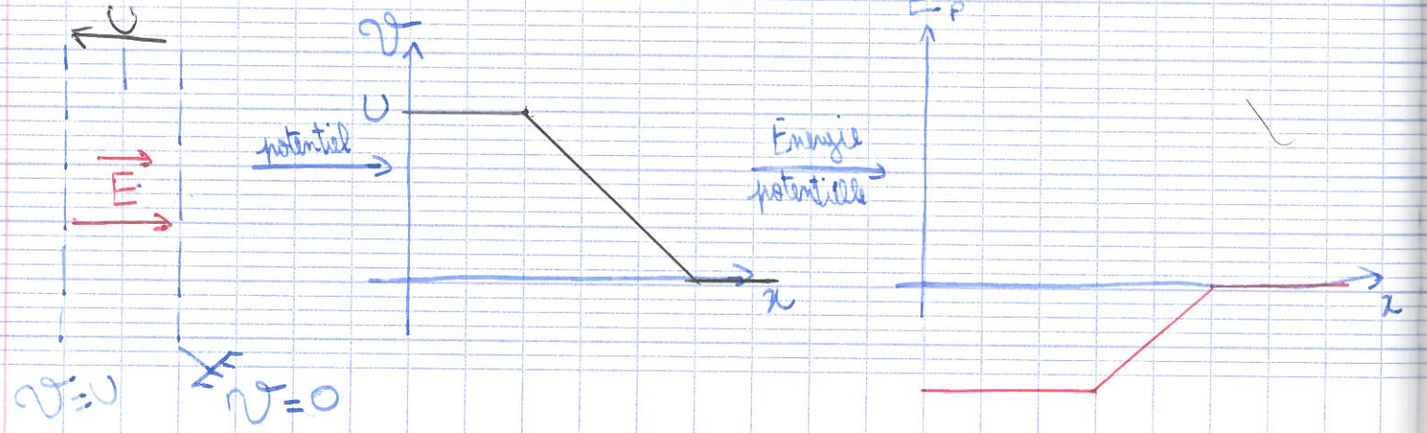
* Exemple : description d'un électron libre dans un métal.



Energie potentielle de l'électron :



Grilles conductrices d'un condensateur

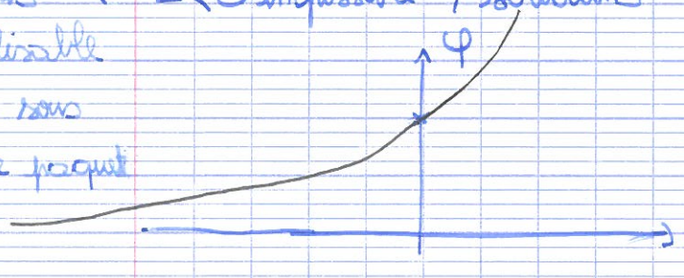


b) Etude de la zone $x<0$:

▷ $E\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} \rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\varphi$

mais réalisable ne sous de paquet de

← $E<0$ impossible, solutions $\varphi = Ae^{\alpha x} + \cancel{Be^{-\alpha x}}$



▷ Pour $E>0$: $\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -k^2\varphi \rightarrow \varphi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

donc $\Psi = Ae^{i(kx - \frac{Et}{\hbar})} + Be^{i(-kx - \frac{Et}{\hbar})}$ superposition de 2 ondes de dBroglie particules qui rebondissent sur le mur de pot

$J = \frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\left(\bar{\Psi}\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)$ $\quad (A,B)\in\mathbb{C}$ a priori

$\bar{\Psi}\frac{\partial\Psi}{\partial x} = \left(\bar{A}e^{-i(kx-\frac{Et}{\hbar})} + \bar{B}e^{-i(-kx-\frac{Et}{\hbar})}\right) ik\left(Ae^{i(kx-\frac{Et}{\hbar})} - Be^{i(-kx-\frac{Et}{\hbar})}\right)$

$= ik\left[A\bar{A} - B\bar{B} - B\bar{A}e^{-i(kx-\frac{Et}{\hbar})}e^{i(-kx-\frac{Et}{\hbar})} + \bar{B}Ae^{-i(kx-\frac{Et}{\hbar})}e^{i(kx-\frac{Et}{\hbar})}\right]$

$2i\,\mathrm{Im}(\,)$

Donc $\boxed{J = \frac{\hbar}{m}k|A|^2 - \frac{\hbar k}{m}|B|^2}$ → Résultat à admettre

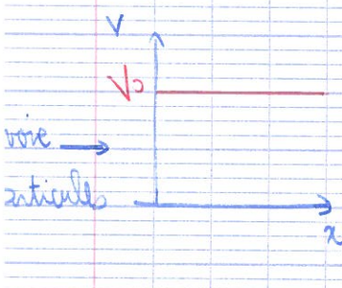
J_A $\qquad$ J_B

▷ Le courant de probabilité est simplement la somme de celui dû à l'onde progressive vers la droite et de celui dû à l'onde progressive vers la gauche.

▷ Définition : le coefficient de réflexion : $R = \frac{|J_B|}{|J_A|} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$

c) Le cas où $E > V_0$:

Calcul des coefficients de réflexion et transmission :



$$E\varphi = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + V_0\varphi$$

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{-2m(E-V_0)}{\hbar^2}\varphi \quad , \quad k_0 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

$\varphi = Ce^{ik_0x} + \cancel{De^{-ik_0x}}$ → pas de "source" de particules à droite du système (à l'infini)

Continuité de φ : $\varphi(x=0^-) = \varphi(x=0^+) \longrightarrow A+B=C$

Continuité de $\frac{d\varphi}{dx} \longrightarrow ik(A-B) = ik_0C$

$$\longrightarrow \begin{cases} k(A-B) = k_0C \\ k(A+B) = kC \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 2kA = (k+k_0)C \\ C = A\,\frac{2k}{k+k_0} \text{ et } B = C-A \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} C = A\cdot\frac{2k}{k+k_0} \\ B = \frac{k-k_0}{k+k_0}A \end{cases}$$

A dépend du flux de particules envoyé par la gauche

▷ Coefficient de réflexion : $R = \left(\frac{|B|}{|A|}\right)^2 = \left(\frac{k-k_0}{k+k_0}\right)^2$

▷ Coefficient de transmission : $T = \frac{\text{Débit sortant } (x>0)}{\text{Débit entrant (onde A)}} = \frac{J_C}{J_A}$

$$\rightarrow T = \frac{k_0}{k}\left|\frac{C}{A}\right|^2 \text{ donc } T = \frac{k_0}{k}\,\frac{4k^2}{(k_0+k)^2} = \frac{4kk_0}{(k_0+k)^2}$$

$\underline{R+T=1}$ conservation du nombre de particules (de probabilité)

d) cas où $E < V_0$ (évanescence)

Pour $x>0$ $E\varphi = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + V_0\varphi$

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{-2m}{\hbar^2}(E-V_0)\varphi \quad , \quad k_0 = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

$$\varphi = C e^{k_0 x} + D e^{-k_0 x}$$

non normalisable.

▷ Continuité de φ en 0
▷ Continuité de $\frac{d\varphi}{dx}$ en 0.

$k_0 \leftarrow ik_0$: calculs identiques à ce qui précède sauf que k_0 est remplacé par ik_0.

$\frac{D}{A} = \frac{2k}{k+ik_0}$, $\frac{B}{A} = \frac{k-ik_0}{k+ik_0}$ coefs de reflexion et de transmission

$T = \frac{J_{x>0}}{J_A} \longrightarrow J = \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im}\left(\bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial x}\right)$

$$\bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial x} \rightarrow \bar{D} e^{-k_0 x} (-k_0) D e^{-k_0 x}$$

$\rightarrow J_{x>0} = 0$, $T = 0$, $R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$: en accord avec la mécanique classique

Mais $x>0$: $\psi = D e^{-k_0 x} e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ avec $D \neq 0$

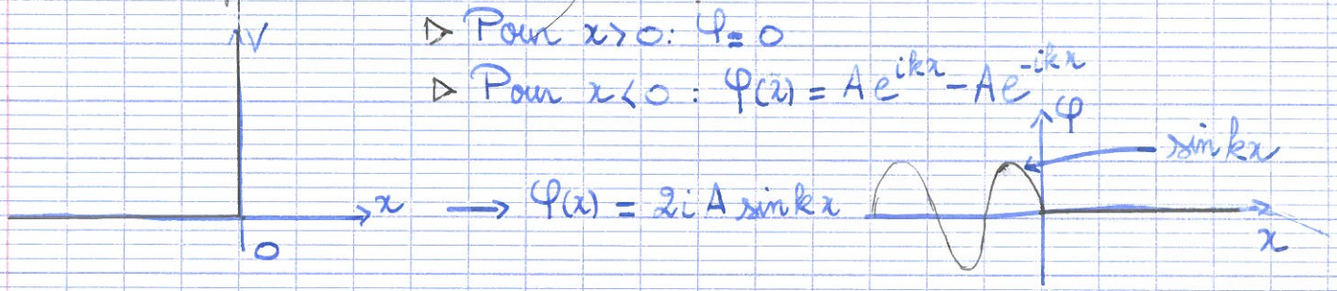
probabilité de présence pour $x>0$: $dp = |\psi|^2 dx \neq 0$ associée à une onde evanescente

$\rightarrow |D|^2 e^{-2k_0 x} dx$

Epaisseur caractéristique d'evanescence $\frac{1}{k_0} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$ → energie manquante pour traverser la barrière

Exemple : electron $V_0 - E \sim 1\,eV$, $\frac{1}{k_0} \sim \frac{10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 10^{-30} \times 1,6 \cdot 10^{-19}}} \sim \frac{10^{-34}}{\sqrt{32 \cdot 10^{-50}}} = \frac{10^{-9}}{5} = 0,2\,nm$

e) Que se passe-t-il si $V_0 \rightarrow \infty$?



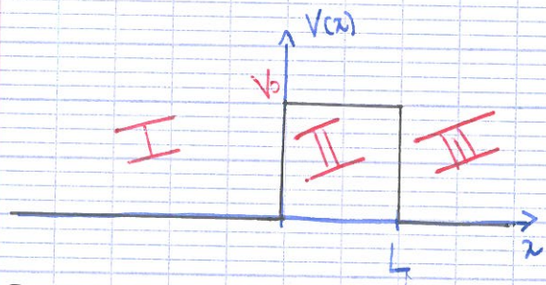
▷ Pour $x>0$: $\varphi = 0$
▷ Pour $x<0$: $\varphi(x) = A e^{ikx} - A e^{-ikx}$

$\rightarrow \varphi(x) = 2iA \sin kx$

En présence d'un saut infini, φ est continue mais non dérivable.

3) Exemple 2 : barrière de potentiel.

a) Situation étudiée :



b) Parties où V = 0

▷ $x < 0$ ou $x > L$: $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

$\varphi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, $\varphi_{III} = Ee^{ikx} + \cancel{Fe^{-ikx}}$ → exclu si pas d'onde de matière envoyée depuis $+\infty$

→ $J_I = J_A + J_B = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 - \frac{\hbar k}{m}|B|^2$

→ $J_{III} = \frac{\hbar k}{m}|E|^2$

c) Cas où $E > V_0$, étude des coefficients R et T

▷ Zone II : $E\varphi = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + V_0\varphi$, $k_0 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$

$\varphi_{II} = Ce^{ik_0x} + De^{-ik_0x}$

▷ Conditions aux limites (φ et φ') : en $x = 0$:
$$\begin{cases} A + B = C + D \\ k(A - B) = k_0(C - D) \end{cases}$$

en $x = L$: $De^{-ik_0L} + Ce^{ik_0L} = Ee^{ikL}$ et $k_0\left(Ce^{ik_0L} - De^{ik_0L}\right) = kEe^{ikL}$

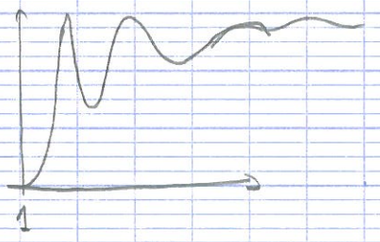
→ Résultat après calcul : $\frac{B}{A} = \frac{(k_0^2 - k^2)2i\sin(k_0L)}{\underbrace{4kk_0\cos(k_0L) - 2i\sin(k_0L)(k^2 + k_0^2)}}$

↳ dénominateur

▷ Coef de réflexion $\left|\frac{B}{A}\right|^2 = R$

incident
$$\frac{E e^{ikL}}{A} = \frac{\Delta k k_0}{\text{dénominateur}}, \quad T = \frac{\mathcal{J}_{III}}{\mathcal{J}_A} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{\Delta E(E-V_0)} \sinh^2 k_0 L}$$
énergie

Coef de transmission en fct de E/V_0



$e^x = e^{-x}$
2

d) Cas où $E < V_0$ $\quad > 0$

▷ Zone III : $\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\varphi$

$\rightarrow \varphi_{II} = C e^{k_0 x} + D e^{-k_0 x}$

$\rightarrow T \lesssim 1$: on recalcule avec $k_0 \leftarrow ik_0$: $T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{\Delta E(V_0 - E)} \sinh^2 k_0 L}$

e) Effet Tunnel

La probabilité de franchir une barrière d'énergie potentielle avec une énergie inférieure à la hauteur de la barrière n'est pas nulle

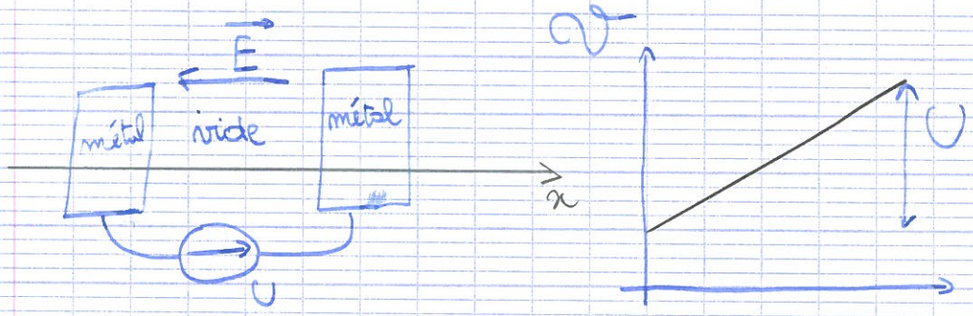
* Evaluation numérique : $k_0 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \sim 10^{10}\ m^{-1}$ pour $\begin{cases} m = m_{\text{électron}} \\ V_0 - E \sim 1\,eV \end{cases}$

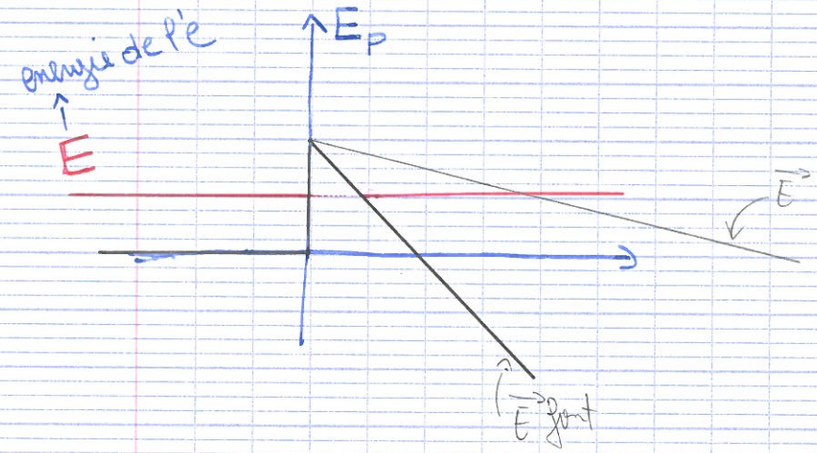
pour $x \gtrsim L/5$ au $\sinh x \sim \frac{e^x}{2} \rightarrow \boxed{T \sim \frac{16E}{V_0^2}(V_0 - E) e^{-2k_0 L}}$

On évalue la proba à l'échelle macroscopique $k_0 = 10^{34}\ m^{-1}$: $T \sim e^{-10^{34}}$ impossible

▷ Echelle microscopique : tant que L n'est pas très grand devant $\frac{1}{k_0} \sim 10^{-10}\ m$

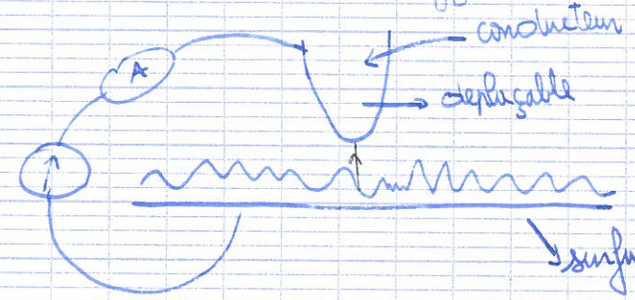
* Exemple : extraction d'un électron d'un métal.





L'électron traverse la barrière de potentiel par effet tunnel

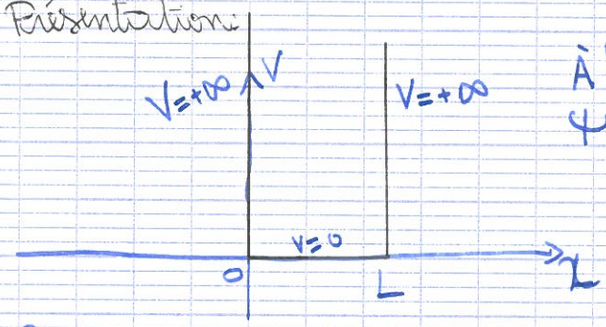
▷ Le microscope à effet tunnel, 1986 Binnig Rohrer



Mesure de la probabilité pour un électron de passer par effet tunnel

4) Exemple 3 : puits de potentiel infini :

a) Présentation :



À la limite de la barrière infinie de potentiel Ψ va tendre vers 0⁻ (Valeur de la fonction au delà)

pour un état stationnaire $\Psi = \varphi(x) e^{-i\omega t}$

▷ φ n'est pas de classe $\mathcal{C}^1$ car V diverge → pas de condition sur $\frac{d\varphi}{dx}$ en $x=0$ et $x=L$.

b) Energie de confinement :

▷ $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$

· Juste pour le b), on change d'origine : puits de $x=-L/2$ à $L/2$

donc $x^2 \leq \frac{L^2}{4} \rightarrow (\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \rightarrow \langle x^2 \rangle \leq \frac{L^2}{4}$

Et alors $(\Delta x)^2 \leq \frac{L^2}{4}$ et on a $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow (\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{L^2}$

$\langle p^2 \rangle = (\Delta p)^2 + \langle p \rangle^2 \geq (\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{L^2} \rightarrow E = \langle E \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + 0$

$\geq \frac{\hbar^2}{2mL^2} > 0$

↳ énergie de confinement.

▷ Dans un puits de potentiel, en mécanique quantique, l'énergie ne peut pas être aussi proche qu'on veut du minimum d'énergie potentielle.

c) Fonctions d'ondes pour les états stationnaires :

▷ Equation de Schrödinger : $E\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + 0, x \in]0, L[$

C° de φ : $\varphi \xrightarrow[x \to 0^+]{} 0$, $\varphi \xrightarrow[x \to L^-]{} 0$

→ $E < 0$: solutions en sh et ch : ne respecte pas la C°

→ $E > 0$: solutions en sin et cos :

On pose : $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -k^2\varphi$

Donc $\varphi = A \sin kx + B \cos kx \rightarrow$ C Lim : $B = 0$

possible pour $k = \frac{n\pi}{L}$, $n \in \mathbb{N}^* \rightarrow \varphi(x) = A \sin \frac{n\pi x}{L}$

Normalisation : $\int_0^L |\varphi|^2 dx = 1 \rightarrow |A|^2 \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx$

Aucun intérêt pratique

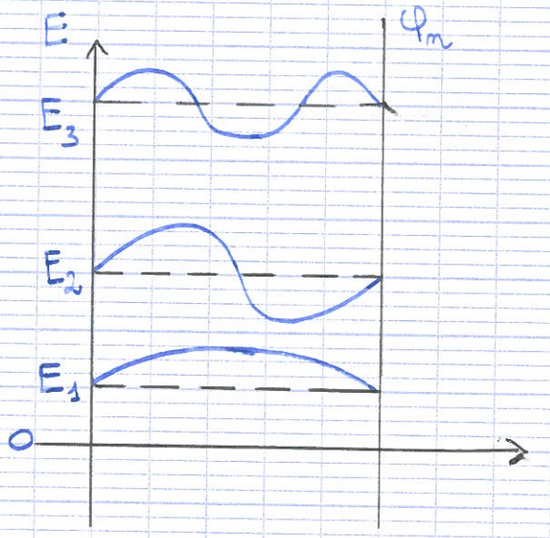
On a alors $A = \sqrt{\frac{L}{2}} e^{i\theta}$, d'où $\boxed{\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} e^{i\theta} \sin \frac{n\pi x}{L}}$

état stationnaire d'indice n dans le puits infini

▷ Pour un etat lié : $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$

▷ L'énergie ne peut prendre que des valeurs discrètes

$$E_n = n^2 E_1 = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$



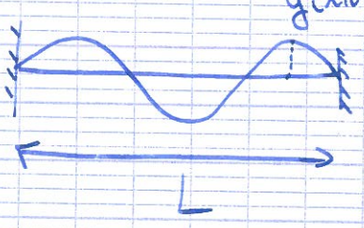
e) Analogie avec les modes propres d'une cavité électromagnétique ou des vibrations sur une corde:

▷ Electromagnétique dans le vide en dim 1 :

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

▷ Mode propre : $\psi(x,t) = \varphi(x)\, e^{-i\omega t}$

▷ Cavité entre 2 conducteurs parfaits ou corde fixée entre 2 extrémité



$x=0, x=L \rightarrow y=0$ / $x=0, x=L$ $\vec{E}_{tan} = \vec{0}$

▷ Mecanique quantique en dim 1

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

▷ Etat stationnaire : $\psi = \varphi(x)\, e^{-i\omega t}$

$$\hbar\omega\varphi = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2}$$

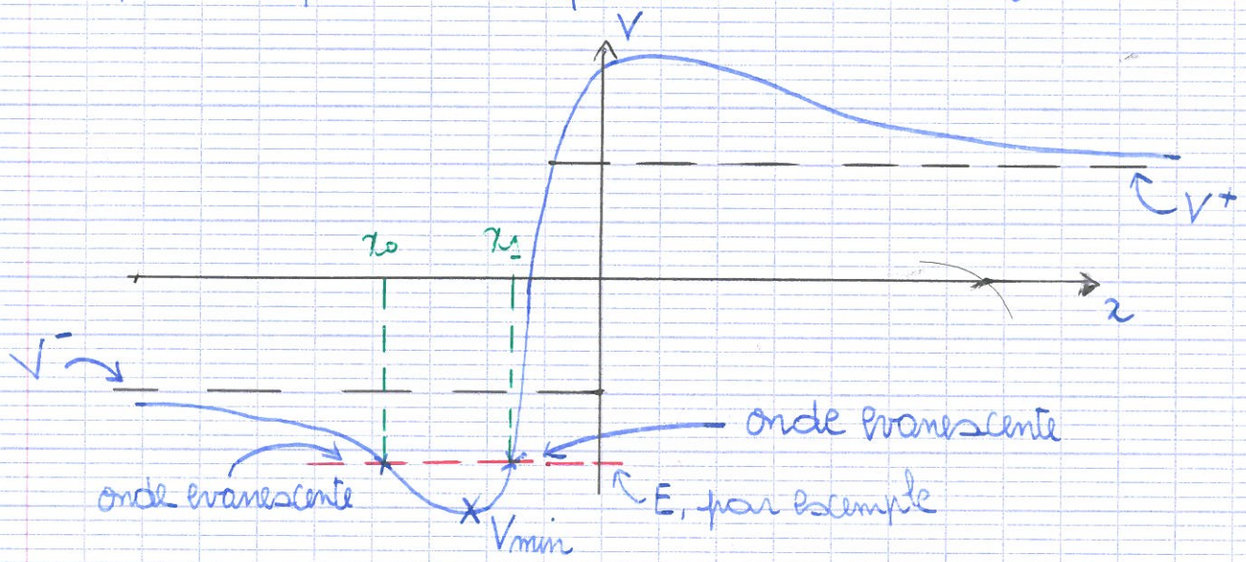
▷ Au bord d'un mur de potentiel infini

$\varphi(x) \xrightarrow[\text{ou } x \to L]{x \to 0} 0$

5) Compléments

Ⓐ Etats de diffusion, etats liés en mécanique quantique

Ⓗ V potentiel dépendant de x qui admet des limites en $\pm\infty$

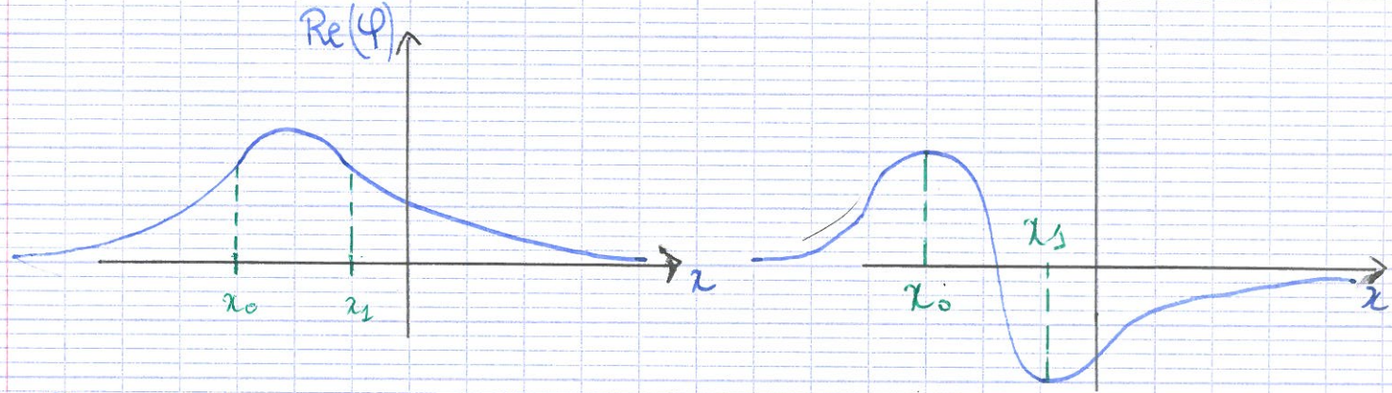


▷ Osef du signe de V^+, V^-, origine de V arbitraire.

▷ Etat stationnaire : $E\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + V(x)\varphi$

→ $E < V_{min}$ impossible : $\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V-E)\varphi$: fonction d'onde non normalisable même sous forme de paquets.

* $V_{min} < E < \min(V_-, V_+)$



▷ Particule localisée → état lié

▷ Ensemble discret de valeurs de E possibles ← énergie quantifiée

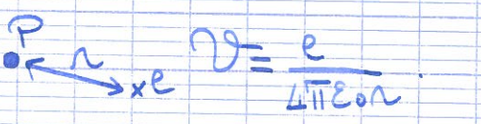
* $E > \min(V_-, V_+)$: état de diffusion, pour $x \to -\infty$ $\varphi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

↳ particule non localisée.

→ Résumé sur un tableau:

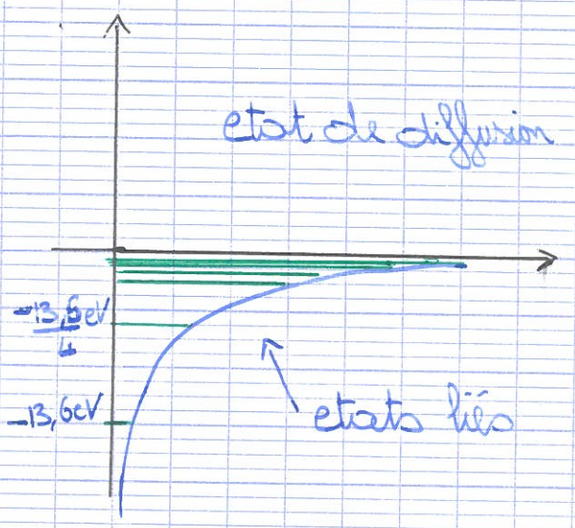
Etats liés	Etat de diffusion
* E plus petite que les 2 limites à l'∞	* E plus grande que l'une des limites à l'∞
* $\|\Psi\|^2$ non négligeable sur un domaine borné	* interprétation de Ψ (flot incident et réfléchi
* $\|\Psi\|$ normalisable	* Particule non-localisée
* Spectre discret	* Spectre continu d'énergie

*Exemple: Atome H:



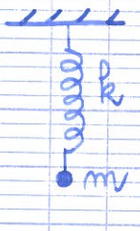
$$V = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$E_p = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$



b) Le potentiel harmonique:

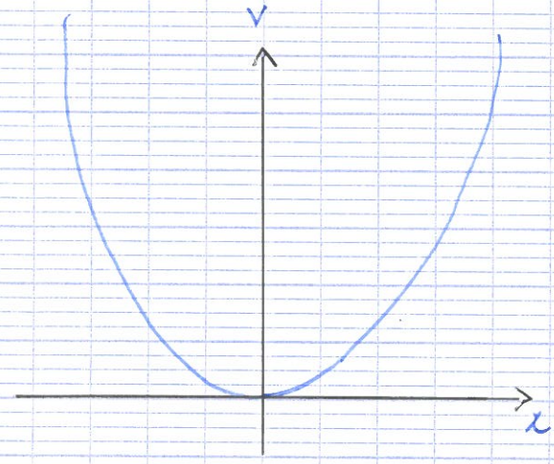
Description quantique de:



$$\begin{cases} E_p = \frac{1}{2}k(x - x_{eq})^2 \\ \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} \end{cases} \longrightarrow x = x_{eq} + A\cos(\omega_0 t + \varphi)$$

▷ En méca quantique: $\boxed{V = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2}$ → $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \Psi$

oscillateur harmonique quantique: que des états liés



→ puits de potentiel harmonique

→ Calculs : $E = \frac{1}{2}\frac{p^2}{m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$

$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$

$\langle p^2 \rangle \geq (\Delta p)^2$, $\langle x^2 \rangle \geq (\Delta x)^2$

$E = \langle E \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \langle x^2 \rangle \geq \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (\Delta x)^2$

$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

$(\Delta p)^2 (\Delta x)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$

$\geq$ Valeur pour 2 termes identiques

→ $\frac{\hbar^2}{4m} = m \omega_0^2 \left((\Delta x)^2\right)^2$ → $\frac{\hbar^2}{4m^2\omega_0^2} = (\Delta x)^4$

→ $(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega_0}$

Donc $E \geq \frac{m\omega_0^2}{2m\omega_0}\hbar = \frac{\hbar\omega_0}{2}$, la valeur $\frac{\hbar\omega_0}{2}$ peut être atteinte

On montre que les états stationnaires ont pour énergie

$$\boxed{\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 \text{ , } n \in \mathbb{N}}$$ (→ culture générale)

IV Etats non stationnaires

1) Principe de superposition en mécanique quantique

Toute superposition d'états possibles est un état possible quel que soit le système étudié.

Pour nous : particule non relativiste : $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V\Psi$

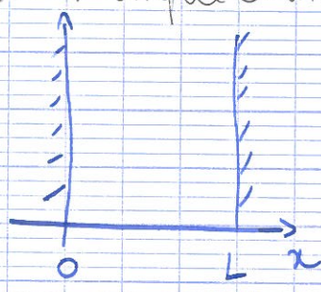
$\Psi_1(M,t)$ et $\Psi_2(M,t)$ vérifient l'équation $\Rightarrow a\Psi_1 + b\Psi_2$ vérifie la même équation

Exemple analogue au chat de Schrödinger :
1 particule instable → durée de vie τ, désintégration

$$\overline{dP} = \frac{dt}{\tau} \quad \text{(probabilité entre } t \text{ et } t+dt\text{)} \longrightarrow N \text{ particules entre } t \text{ et } t+dt,\ dN = -N\frac{dt}{\tau} \rightarrow N = N_0 e^{-t/\tau}$$

2) Etat le plus général d'un système quantique

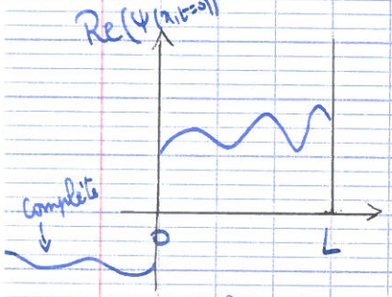
A) Exemple d'une particule dans un puits infini



états stationnaires $\Psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{n\pi x}{L}\, e^{-\frac{iE_n}{\hbar}t}$

$n \in \mathbb{N}^*$ $E_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2mL^2} = \hbar\omega_n$

B) On connaît la fonction d'onde $\Psi(x,t=0)$



On complète sur $\mathbb{R}$ en une fonction impaire de période $2L$, $\tilde{\Psi}$

* Décomposition en série de Fourier : $\tilde{\Psi} = \sum b_n \sin\left(\frac{2n\pi x}{2L}\right)$

→ sur $]0,L[$ $\Psi(x,t=0) = \sum b_n \sin\frac{n\pi x}{L}$ (On connaît les b_n car on connaît Ψ)

→ $$\boxed{\Psi(x,t>0) = \sum_n b_n \Psi_n(x,t)\sqrt{\frac{2}{L}}}$$

b) Généralisation :

▷ Tout état est une superposition d'états stationnaires du système quantique étudié (à condition que $V(x,t)$)

3) Exemple de superposition de deux états stationnaires

Etats 1, 2 : $\Psi_1 = \varphi_1(x) e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}}$

$\Psi_2 = \varphi_2(x) e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}}$

Superposition $\Psi_1 + \Psi_2 = \varphi_1 e^{-E_1 t/\hbar} + \varphi_2 e^{-E_2 t/\hbar}$, on pose $\varphi_1(x) = \varphi_1^0(x)\, e^{i\theta_1(x)}$ (φ_1^0 : module)

pareil pour φ_2

donc $|\Psi|^2 = \Psi\bar{\Psi} = \left(\varphi_1 e^{-E_1 t/\hbar} + \varphi_2 e^{-E_2 t/\hbar}\right)\left(\bar{\varphi}_1 e^{+E_1 t/\hbar} + \bar{\varphi}_2 e^{E_2 t/\hbar}\right)$

$\rightarrow |\Psi|^2 = \varphi_1^{0\,2} + \varphi_2^{0\,2} + 2\,\mathrm{Re}\left(\underbrace{\varphi_1 \bar{\varphi}_2}_{\hookrightarrow \varphi_1^0 \varphi_2^0 e^{i(\theta_1 - \theta_2)}} e^{i\left(E_2 t/\hbar - E_1 t/\hbar\right)}\right)$

d'où $|\Psi|^2 = \varphi_1^{0\,2} + \varphi_2^{0\,2} + 2\,\varphi_1^0 \varphi_2^0 \cos\left(\underbrace{\theta_1 - \theta_2}_{\text{fct de } x} + \frac{E_2 - E_1}{\hbar} t\right)$

$\rightarrow$ Dépendance temporelle de $|\Psi|^2$ de pulsation $\frac{E_2 - E_1}{\hbar}$ $\Rightarrow$ état non stationnaire évoluant périodiquement

à $\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$

* Commentaires :

▷ Énergie : superposition de 2 états stationnaires d'énergies E_1, E_2 : mesure de l'énergie ? On ne peut obtenir que E_1 et E_2

Si Ψ_1 est normalisé et Ψ_2 aussi : $\Psi = a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2$: $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1 \Rightarrow \Psi$ normalisé

* La probabilité de trouver l'énergie | E_1 vaut $|a_1|^2$; E_2 vaut $|a_2|^2$

④ Exemple de superposition dans un puits infini

* Superposition φ_n, φ_{n+1} : $\frac{E_{n+1} - E_n}{\hbar} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2\hbar}\left((n+1)^2 - n^2\right)$

$= \frac{\hbar \pi^2}{2mL^2}(2n+1)$

Donc $\omega = \frac{E_{n+1} - E_n}{\hbar} \sim \frac{\hbar \pi^2}{mL^2}$ $\rightarrow T_{\text{oscillation}} = \frac{2mL^2}{\hbar \pi n}$

$k = \frac{n\pi}{L}$, $v_g = v_{\text{particule}} = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{\hbar n \pi}{mL}$

$T = \frac{2L}{v_g} = \frac{2L}{v_{\text{particule classique}}}$, vision classique



Ex: superposition d'états stationnaires d'un oscillateur harmonique quantique

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 \longrightarrow \Psi(x,t) = \sum b_n \varphi_n(x)\, e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}}$$

$$= e^{\frac{-i\omega_0 t}{2}} \left(\sum b_n \varphi_n(x) e^{-in\omega_0 t}\right)$$

V Conclusion :

Dans quel cas on a besoin d'une nouvelle théorie physique ?

▷ Présence d'incompatibilité entre anciennes théories et l'expérience

* Fin XIX^e : Rayonnement corps noir → existence par l'expérience / théorie (thermodyn + électromag) incompatible
  - dualité onde-corpuscule ← effet photoélectrique
  - discrétion d'états liés ← raies spectrales des lampes à vapeur atomique → quantification d'énergie
  - fondamental = état stationnaire ← stabilité de la matière

▷ Validation d'une nouvelle théorie ?

* Retrouver les anciens résultats
* Elimination des incompatibilités

▷ Prédiction de nouveaux phénomènes

* Aspect ondulatoire : interférences d'onde de matière ; diffraction de particules
* Effet tunnel
* Introduction du moment cinétique de spin
* À chaque particule correspond une anti-particule
* Applicable à l'électromagnétisme → électrodynamique quantique
* Interaction forte, interaction faible → modèle standard de la physique des particules : particules élémentaires : e + quarks + neutrinos + vecteurs d'interactions (↳ gluons, photons etc.)

▷ Lacune : gravitation ? On arrive pas à quantifier la gravitation

« À vous de jouer » - Langevin