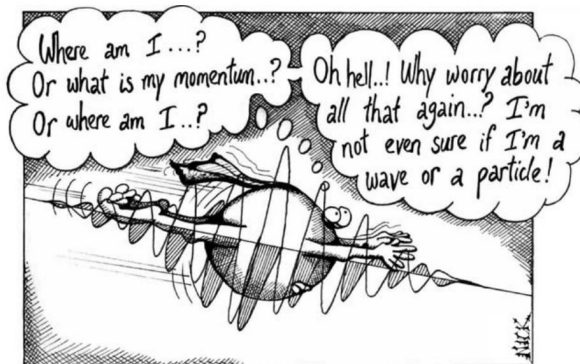


# COURS DE MECANIQUE QUANTIQUE

« Si vous m'avez compris c'est que je n'ai pas été assez clair »

*Richard Feynman, prix Nobel de physique en 1965, à ses étudiants de l'université de Berkeley à la fin de son cours de mécanique quantique*

## I Le photon



Photon self-identity problems.

Figure 1

### I.1) Lien entre la notion de photon et les interférences ?

L'expérience des trous (ou des fentes) d'Young (1801)

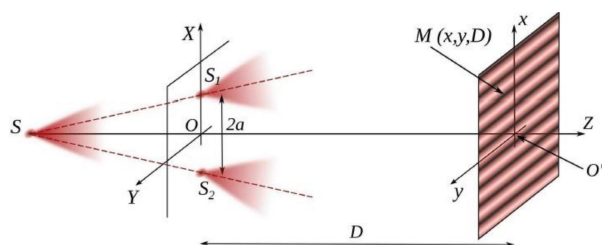


Figure 2

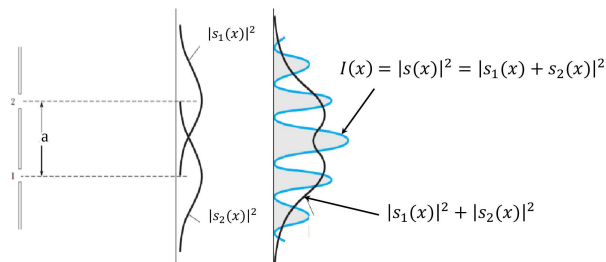


Figure 3

$$\lambda = cT = \frac{c}{\nu} \quad ; \quad \omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi}{T}$$

$$I(x) = 2I_0 \left[ 1 + \cos \left( 2\pi \frac{(2a)x}{\lambda_0 D} \right) \right]$$

- ✘ La source lumineuse a émis  $n_0$  photons pendant un temps  $\Delta t$ . L'intensité de la source est  $I_0$ .
- ✘ Soit  $n(x)$  le nombre de photons qui arrivent au point M de coordonnées  $x$  sur l'écran pendant ce temps  $\Delta t$ . La proportion de photons,  $P(x)$ , au point M, sachant que  $n(x) \propto I(x)$ <sup>1</sup>, est alors :

$$P(x) = \frac{n(x)}{N_0} = \frac{I(x)}{I_0} = \frac{|s(x)|^2}{I_0}$$

Ainsi, la probabilité de trouver un photon en  $x$  est donc proportionnelle à  $|s(x)|^2$

1. En effet :  $I = \frac{\langle P \rangle}{S} = \frac{1}{S} \frac{dE}{dt} = \frac{hc}{\lambda S} \frac{dN}{dt} = \frac{hc}{\lambda S} n \propto n$

✘ Les images figures 4 et 5, montrent le résultat d'interférences réalisées photon par photon<sup>2</sup>. Au départ, on distingue clairement les impacts de photons ayant traversé le dispositif interférentiel : les photons se comportent bien comme des particules. Après un grand nombre d'impacts, la figure d'interférences se reconstitue : cette figure d'interférences peut être interprétée simplement avec une approche ondulatoire. Ainsi les expériences d'interférences photon par photon permettent de mettre en évidence le double aspect ondulatoire et corpusculaire de la notion de photon.

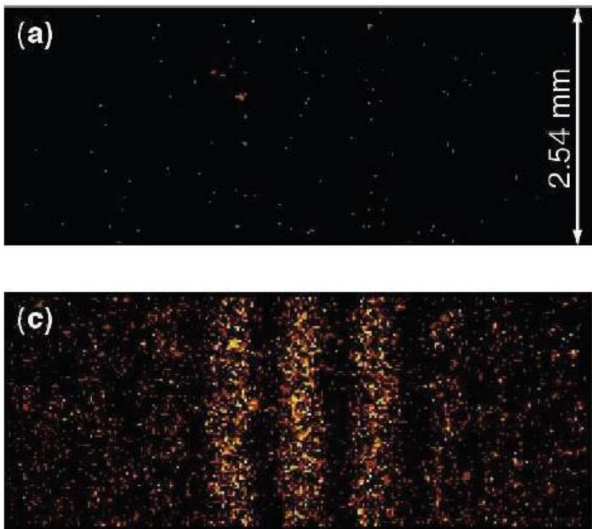


Figure 4 – Interférences photon par photon : visualisation des impacts

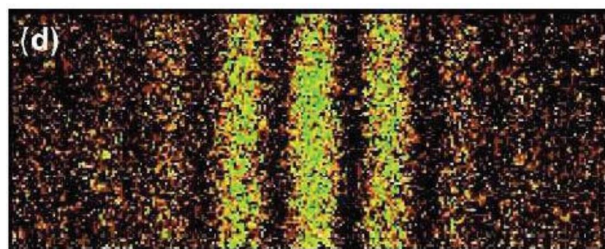


Figure 5 – Interférences photon par photon : formation de la figure d'interférences

### I.2) Rayonnement du corps noir

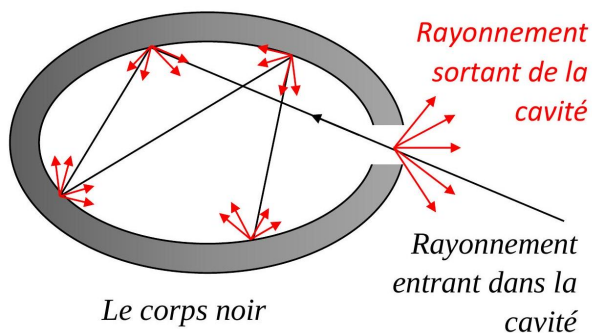


Figure 6 – Le modèle du corps noir

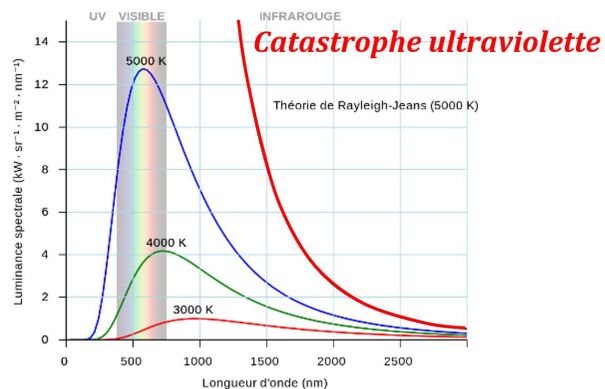


Figure 7 – Profil spectral d'un corps noir en fonction de la température

Résultats les plus importants :

✘ Loi de Wien :

$$\lambda_m = 2,898 \times \frac{10^{-3}}{T} (m)$$

✘ Loi de Stefan :

$$\varphi = \sigma T^4$$

2. Cette expérience est restée longtemps une expérience de pensée, proposée notamment par R. Feynman (voir exercice). Elle a été mise en œuvre, avec un biprisme de Fresnel, seulement en 1985 par P. Grangier et A. Aspect.

✗ Loi de Planck :

$$\frac{d\varphi_\nu}{d\nu} = \frac{\frac{2\pi h}{c^2} \nu^3}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1}$$

✗ Les deux premières lois se déduisent de la loi de Planck. La loi de Planck n'a pu être interprétée qu'en termes de quanta (Planck 1900) et par la suite en termes de photons (Einstein 1905).

✗ Simulation Phet : [ICI](#).

### I.3) Effet photoélectrique

Une plaque de métal éclairée par un faisceau lumineux de fréquence  $\nu$  émet des électrons :

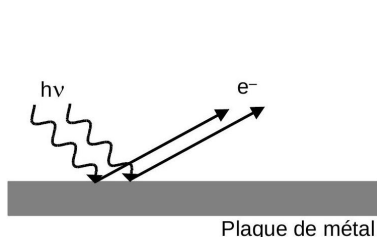


Figure 8

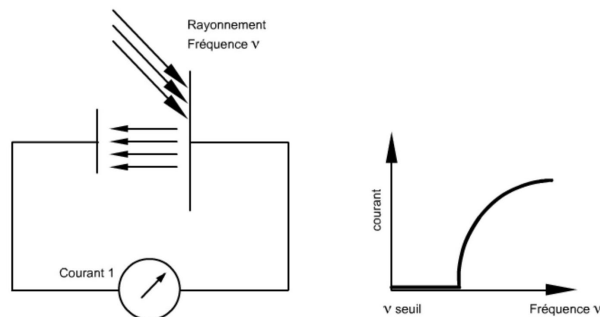


Figure 9

✗ En dessous d'une certaine valeur seuil de la fréquence du rayonnement, notée  $\nu_0$ , aucun électron n'est émis et ce quelque soit l'intensité du rayonnement incident. Autrement dit : l'émission d'électrons n'est pas conditionnée par l'intensité du rayonnement mais uniquement par sa fréquence. **Ceci est en contradiction avec les prédictions du modèle ondulatoire.** En effet, dans le modèle de l'électron élastiquement lié, plus l'amplitude du champ  $\vec{E}$  est élevée (et donc plus l'intensité du rayonnement est élevée), plus l'amplitude des vibrations de l'électron est élevée. Il doit donc exister une intensité limite pour laquelle la liaison est rompue et ce n'est pas ce que l'on observe.

✗ Interprétation :

- ☛ Les électrons dans le métal se trouvent dans un état lié : La valeur de l'énergie de liaison est une caractéristique propre à chaque métal, elle est notée  $W$  (**travail d'extraction**).
- ☛ La lumière est constituée de paquets d'énergie (les photons) qui sont absorbés et émis par la matière : l'énergie transportée par un photon est  $E = h\nu$ . La nature discontinue des quanta n'est alors plus une propriété de l'interaction entre la matière et le rayonnement (Planck) mais une caractéristique intrinsèque au rayonnement lui-même. Dans l'effet photoélectrique, la notion de **fréquence seuil** est facilement interprétée si l'on considère que pour qu'un électron soit éjecté par un photon incident, il faut que l'énergie du photon soit supérieure au travail d'extraction du métal.
- ☛ La relation entre  $W$  et l'énergie cinétique maximale des électrons émis est :

$$h\nu = W + E_{c,\max}$$

- ☛ La fréquence seuil est donc :

$$\nu_0 = \frac{W}{h}$$

⇒ L'effet photoélectrique ne peut être interprété qu'en termes de photons, c'est pour ce résultat qu'Einstein a eu le prix Nobel en 1921.

- ✘ Planche d'oral CCS : [ICI](#) et son corrigé sur E-Learning [ICI](#)
- ✘ Simulation Phet : [ICI](#)

#### I.4) Effet Compton

- ✘ Un faisceau incident de rayon X rentrent en collision avec les électrons libres d'un matériau.

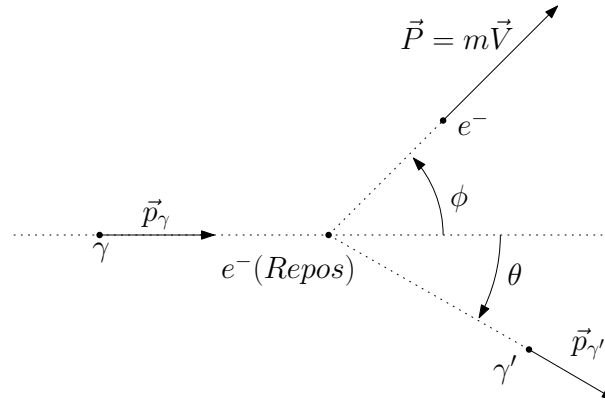


Figure 10

- ✘ En analysant, à divers angles de diffusion  $\theta$ , les rayons X diffusés, on observe un premier pic de **diffusion élastique** (sans changement de longueur d'onde) et un second pic de **diffusion inélastique** avec une modification de la longueur d'onde.

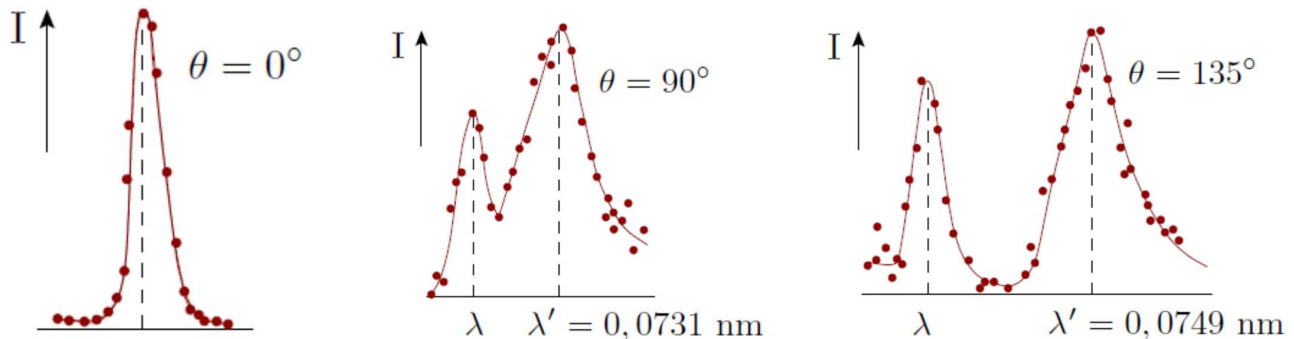


Figure 11  
 $\lambda = 0,0709 \text{ nm}$

Figure 12

- ✘ L'écart en longueur d'onde ne dépend ni de  $\lambda_i$  ni de la nature du matériau diffuseur :

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_0c}(1 - \cos\theta)$$

- ✘ Interprétation : Le faisceau incident est constitué de photons qui rentrent en collision avec les électrons libres du matériau.
- ✘ Correction : [ICI](#)

#### I.5) La pression de radiation

La pression de radiation peut être interprétée avec une approche ondulatoire mais aussi une approche corpusculaire.

- ✘ Approche ondulatoire :

$$u_{em,i} = \frac{1}{2}\varepsilon_0 E_0^2$$

$$P_{\text{rad}} = 2 \times u_{em,i} = \varepsilon_0 E_0^2$$

✘ Approche corpusculaire :

$$nhv = u_{em,i}$$

$$P_{\text{rad}} = 2 \times (nhv)$$

✘ Application à la pression de radiation sur un grain de poussière d'une comète situé à une distance  $r$  du soleil :

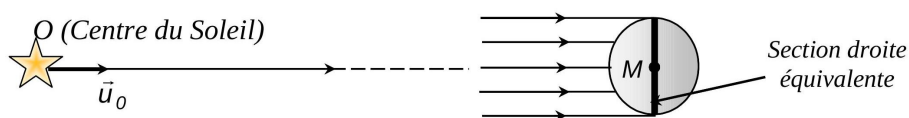


Figure 13

- $a$  : rayon de la particule de poussière
- $r$  : distance au Soleil de la particule
- $P$  : puissance totale émise par le Soleil

Sachant que :

$$P = 4\pi r^2 \langle Pi \rangle = 4\pi r^2 \frac{E_0^2}{2\mu_0 c}$$

et,

$$P_{\text{rad}} = \varepsilon_0 E_0^2$$

on en déduit :

$$P_{\text{rad}} = \frac{P}{2\pi cr^2}$$

Ordre de grandeur pour une poussière située à proximité de la terre :  $P_{\text{rad}} = 3 \times 10^{-5}$  Pa.

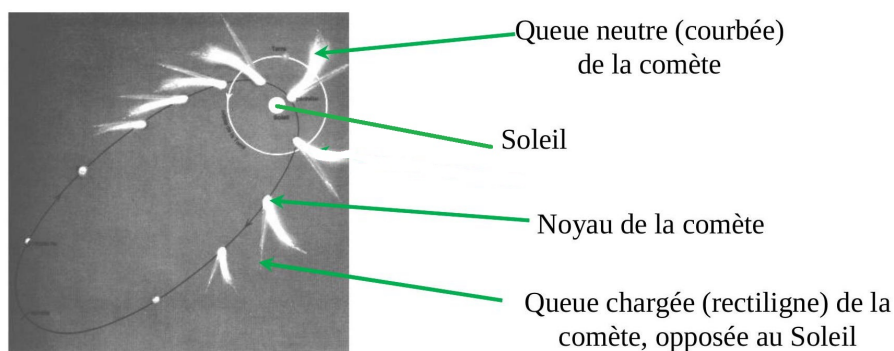


Figure 14

## I.6) Les relations de Planck - Einstein

Les relations entre l'aspect ondulatoire et l'aspect corpusculaire du **photon** sont appelées les relations de Planck - Einstein :

$$E = hv = \hbar\omega \quad ; \quad p = \hbar k = \frac{E}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad ; \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 6,62 \times \frac{10^{-34}}{2\pi} = 1,05 \times 10^{-34} (J.s)$$

## II Dualité onde-corpuscule



Microscope électronique dont le fonctionnement est basé sur la nature ondulatoire des électrons

### II.1) Postulat de Louis De Broglie (1923)

On considère **une particule matérielle**, de masse  $m$ , de vitesse  $V$ , de quantité de mouvement non relativiste  $\vec{p} = m\vec{V} = mV\vec{u}$  et d'énergie  $E$ .

Cette particule présente alors un caractère ondulatoire :

✘ De fréquence :



$$\nu = \frac{E}{h}$$

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

✘ longueur d'onde :



$$\lambda_{dB} = \frac{h}{p}$$

$$\Leftrightarrow \vec{p} = m\vec{V} = \frac{h}{\lambda_{dB}}\vec{u} = \hbar\vec{k}$$

*Les particules de matière possèdent un double comportement onde-corpuscule*

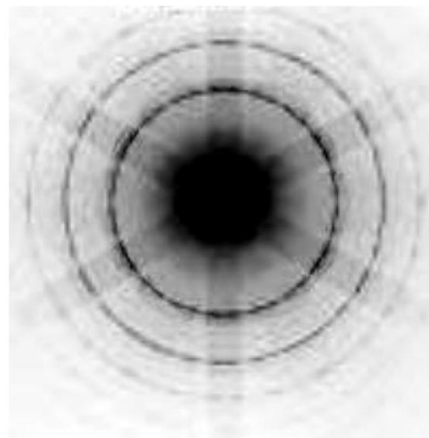
✘ Longueurs d'onde de quelques particules : [ICI](#)

### II.2) Exemples : Interférences d'électrons et de neutrons

L'expérience d'interférences, par des trous de Young, par un faisceau d'électrons fût réalisée en 1961 (Jönsson), en revanche elle fût menée électron par électron seulement en 2004. L'expérience des fentes de Young vue par « tout est quantique » : [ICI](#)



**Figure 15** – Photo de l'expérience historique de Jönsson avec  $E_c = 50 \text{ keV}$ ,  $a = 0.1 \mu\text{m}$



**Figure 16** – Figure de diffraction d'électrons dans un cristal

## II.3) Modèle de Bohr

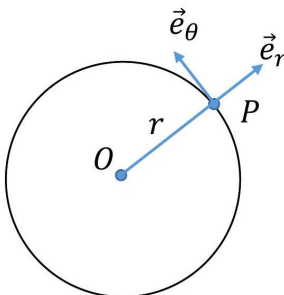
### II.3.a) Description du modèle

- ✘ Fondamentalement, dans une approche classique, l'atome d'hydrogène ne peut pas être un système stable. En effet **toute particule chargée accélérée rayonne** : l'énergie de l'électron devrait donc diminuer rapidement à cause de ce rayonnement et l'électron finirait pas « tomber » sur le noyau. Seule une approche quantique permet d'expliquer la stabilité de l'atome d'hydrogène.



Modèle de Bohr : L'atome d'hydrogène est constitué d'un proton  $O$  (de masse  $M$  et de charge électrique  $+e$ ) et d'un électron  $P$  (de masse  $m \ll M$  et de charge  $-e$ ) qui décrit une orbite circulaire de rayon  $r$  autour du proton. Ce dernier est supposé fixe dans le référentiel d'étude <sup>a</sup>. Dans ce modèle, les seules émissions (ou absorptions) possibles sont liées aux transitions radiatives : un photon est émis (ou absorbé) lorsque l'électron passe d'un niveau d'énergie à un autre. Enfin, l'aspect quantique du modèle est introduit par la quantification du moment cinétique de l'électron.

<sup>a</sup>. référentiel barycentrique de l'atome. L'atome étant isolé, ce référentiel est galiléen



- ✘ Le PDF donne directement :

$$v = \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r}}$$

✘ Les énergies cinétique, potentielle et mécanique de l'électron sont donc :

$$E_c = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

$$E_p = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$E_m = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

✘ Le moment cinétique de l'électron en O vaut :

$$\vec{L}_O = \vec{OP} \wedge m\vec{v} = \underbrace{mrv}_{L_o} \vec{u}_z$$

✘ Hypothèse de Bohr : Quantification du moment cinétique

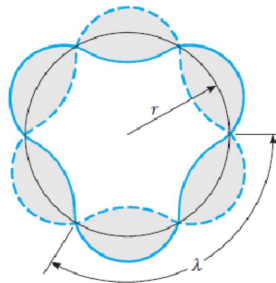


$$L_o = n\hbar$$

( $n$  entier positif appelé nombre quantique principal)

✘ Interprétation de l'hypothèse de Bohr :

- ☛ On peut représenter l'onde de l'électron comme une onde de courant le long de l'orbite comme le ferait une onde le long d'une corde.



**Figure 17** – Onde stationnaire équivalente

- ☛ Si l'on attend un grand nombre de périodes, l'onde va, dans la plupart des cas, s'autodétruire par interférences avec elle-même. Pour que les interférences ne soient pas destructives, il faut que la longueur de l'orbite soit un multiple entier de la longueur d'onde de l'électron. Avec  $r_n$  le rayon de l'orbite<sup>3</sup> :

$$2\pi r_n = n\lambda_{dB} \quad \text{soit} \quad r_n = \frac{n\lambda_{dB}}{2\pi}$$

- ☛ En utilisant :  $\lambda_{dB} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$ , on retrouve la quantification du moment cinétique :

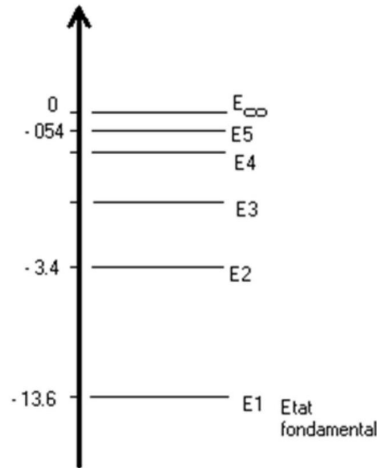
$$mv_n r_n = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$$

3. On a  $L = n\lambda_{dB}$  et non pas  $L = n\lambda_{dB}/2$  afin de respecter la continuité de la dérivée de  $\psi$  par rapport à la position sur l'orbite

✘ On en déduit :

$$r_n = \left( \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m} \right) n^2 = a_0 n^2 \quad \text{avec} \quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m} = \text{rayon de Bohr}$$

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_n} = -\frac{1}{2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{E_0}{n^2} \quad \text{avec} \quad E_0 = \frac{1}{2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m}{\hbar^2}$$



**Figure 18** – Transitions électroniques de l'atome d'hydrogène

✘ Applications numériques et ODG :

$$a_0 = 5,33 \times 10^{-11} \text{ m} \approx 53 \text{ pm}$$

$$E_0 = 2,18 \times 10^{-18} \text{ J} \approx 13,6 \text{ eV}$$

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV}$$

### II.3.b) Spectre de l'atome d'hydrogène

- ✘ En réalisant une décharge électrique dans une ampoule remplie de dihydrogène, les molécules de dihydrogène se dissocient et les atomes excités émettent des rayonnements électromagnétiques de différentes longueurs d'onde.
- ✘ Le physicien J. Balmer détermina expérimentalement que les longueurs d'onde  $\lambda$  de ces rayonnements, situés dans le domaine de la lumière visible, vérifiaient la relation phénoménologique suivante :

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left[ \left( \frac{1}{4} \right) - \left( \frac{1}{p^2} \right) \right] \quad (\text{avec } p = 3, 4, 5, \dots)$$

$R_H$  est la constante de Rydberg :  $R_H = \frac{E_0}{hc} = 1,09 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} = 1,09 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$

Raies	p	$\lambda(\text{nm})$	Couleur
$H_\alpha$	3	656,3	Rouge
$H_\beta$	4	486,1	Bleu
$H_\gamma$	5	434,0	Indigo
$H_\delta$	6	410,2	Violet

- ✘ Notons qu'il existe plus de 4 raies dans la série de Balmer (caractérisée par le niveau d'énergie inférieure ici  $n = 2$ ), mais les autres raies sont situées dans l'UV. Notons enfin qu'il existe une longueur d'onde limite (minimale) correspondant à  $p$  infini :

$$\lambda_l^{\text{Balmer}} = \frac{4}{R_H}$$

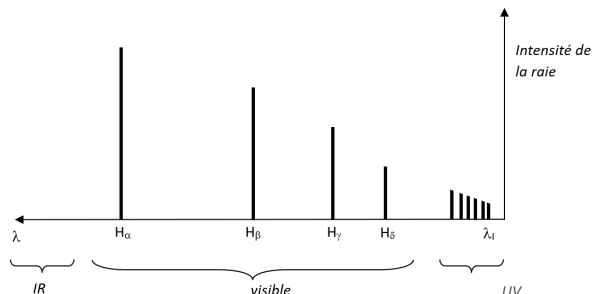


Figure 19 – Ensemble des raies d'émission de la série de Balmer

- ✘ Simulation Phet : [ICI](#)
- ✘ Pourquoi ces raies sont-elles si importantes? tout simplement parce que l'hydrogène représente 92% des atomes dans l'univers (étoiles, nébuleuses, planètes gazeuses) . Le graphe ci-dessous représente le spectre de l'étoile Sirius :

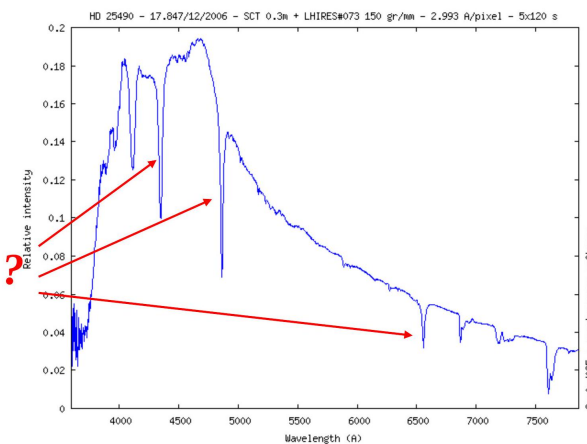


Figure 20 – Quelle est la couleur de l'étoile? d'où viennent les raies d'absorption?

- ✘ Le spectre comporte d'autres raies que celles de la série de Balmer : on classe ces raies par série c'est à dire en fonction du niveau d'énergie inférieur  $n$ . On peut ainsi généraliser la formule de Balmer à la transition radiative entre deux niveaux de nombres quantiques  $n$  et  $p$  :

Formule de Ritz

$$\frac{1}{\lambda_{np}} = R_H \left[ \left( \frac{1}{n^2} \right) - \left( \frac{1}{p^2} \right) \right] \quad (\text{avec } p > n)$$

Nom de la série	$n$	Domaine	$\lambda_l$ (nm)
Lyman	1	UV	91,0
Balmer	2	Visible + UV	364,3
Paschen	3	IR proche	820,0
Brackett	4	IR	1460
Pfund	5	IR	2280

Figure 21

- ✘ Le modèle de Bohr est également adapté pour décrire les ions hydrogénoïdes c'est à dire les ions dont le noyau comporte  $Z$  protons et  $N$  neutrons et ne possédant qu'un seul électron (Exemple :  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$ ,  $\text{Be}^{3+}$ ). Il suffit de l'adapter **en remplaçant dans les formules  $e^2$  par  $Ze^2$**  :

$$E'_0 = Z^2 E_0$$

$$R'_H = Z^2 R_H$$

$$r'_0 = \frac{r_0}{Z}$$

Ainsi, dans le cas des hydrogénoïdes, l'électron est plus fortement lié au noyau.

- ✘ Une première correction du modèle de Bohr consiste à tenir compte de l'entraînement du noyau. On travaille alors dans le référentiel du système (noyau, électron) et on étudie le mouvement d'une particule fictive dont la masse est <sup>4</sup> :

$$\mu = \frac{mM}{m+M}$$

On obtient alors :

$$E''_0 = \frac{\mu}{m} E_0$$

$$R''_H = \frac{\mu}{m} R_H$$

$$r''_0 = \frac{m}{\mu} r_0$$

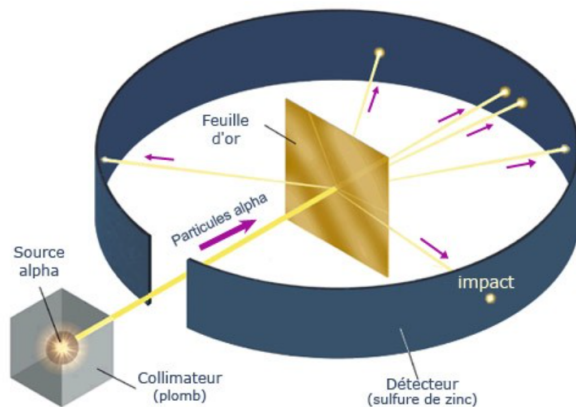
## II.4) Autres exemples

### ✘ Microscope électronique

- Le pouvoir de résolution d'un microscope est limité par la longueur d'onde qu'on utilise, soit une fraction de micromètre en lumière visible.
- En microscopie électronique : avec des rayons « électroniques » de longueur d'onde beaucoup plus courte ; on peut voir des détails beaucoup plus fins qu'avec un microscope optique.

Exemple :  $E_{\text{cin}} = 150\text{eV}$   $v = 7.10^6 \text{ m.s}^{-1}$   $\lambda = 0,1 \text{ nm}$

- ✘ **Diffusion de Rutherford** : L'expérience de Rutherford <sup>5</sup>, montra que la matière est principalement constituée de vide et que la charge positive des atomes se trouve dans un noyau massif et extrêmement compact. Elle est à la base du développement du modèle de Bohr.



**Figure 22** – Expérience de Rutherford : les particules  $\alpha$  sont détectées par scintillation, seule une particule sur 8000 est rétro-diffusée. Cliquez [ICI](#)

4.  $m$  est la masse de l'électron et  $M$  est la masse du noyau

5. Menée en 1909 par Hans Geiger et Ernest Marsden sous la direction d'Ernest Rutherford

- ✘ **Expérience de Stern et Gerlach** : L'expérience de Stern et Gerlach est une expérience de mécanique quantique, mettant en évidence l'existence du spin.<sup>6</sup> Elle consiste à faire passer des atomes d'argent dans un champ magnétique non uniforme de direction verticale. Les atomes d'argent dans leur état fondamental ayant un moment cinétique orbital nul, leur moment magnétique orbital associé est nul également. Ainsi, le faisceau ne devrait classiquement pas subir l'influence du champ magnétique. Cependant, l'expérience montre que le faisceau se sépare en deux. On ne peut donc pas attribuer ce résultat à un moment cinétique orbital. On explique ce phénomène en introduisant la notion de moment cinétique de spin et du moment magnétique associé. Cliquez [ICI](#)
- ✘ **L'effet LASER** : Voir cours LASER. Cliquez [ICI](#) et [ICI](#)

## II.5) Notion d'action

- ✘ Les concepts classiques cessent de s'appliquer lorsque :

$$\text{Action} \approx \hbar$$

- ✘ L'action est une grandeur homogène à une énergie par un temps :

$$[\text{Action}] = [E \times t] = [p_x \times x] = [\text{Moment cinétique}]$$

- ✘ Ainsi, pour savoir si un système doit être considéré comme quantique, il suffit de calculer son action :



Si l'action d'un quanton est de l'ordre de grandeur de  $\hbar$  alors le système est quantique

- ✘ Notons que l'on peut également raisonner avec la longueur d'onde de De Broglie :



si  $\lambda_{dB} \approx$  distance caractéristique du système alors le système est quantique  
 si  $\lambda_{dB} \ll$  distance caractéristique du système alors peut être traité de manière classique

Système	Masse ( $m$ )	Vitesse ( $V$ )	Distance caractéristique ( $a$ )	Action	$\lambda/a$
Homme passant une porte	70 kg	1 m/s	1 m	70 J.s	$10^{-35}$
Globule rouge dans capillaire	$10^{-16}$ kg	0,1 m/s	0,1 mm	$10^{-17}$ J.s	$10^{-11}$
Electron dans fil étroit	$9 \times 10^{-31}$ kg	$10^6$ m/s	1 nm	$9 \times 10^{-34}$ J.s	1

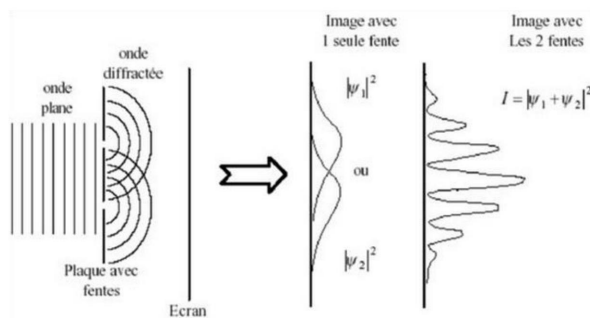
6. L'expérience a été mise au point par Otto Stern et Walther Gerlach en février 1922

### III Les bases de la mécanique quantique



#### III.1) Fonction d'onde

##### III.1.a) Retour sur le phénomène d'interférences



$$P(x) = \frac{n(x)}{N_0} = \frac{I(x)}{I_0} = \frac{|\psi(x)|^2}{|\psi_{\text{source}}|^2}$$

L'état physique d'une particule quantique (un « quanton ») est parfaitement défini par sa fonction d'onde complexe  $\psi(x, t)$  qui représente une "amplitude de probabilité".

La probabilité de présence du quanton, à l'instant  $t$ , entre  $x$  et  $x + dx$ , est donnée par :



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

$|\psi(x, t)|^2$  est appelée "densité de probabilité de présence".

### III.1.b) Définition de la fonction d'onde

- ✗ La description complète de l'état d'une particule de masse  $m$  dans l'espace à l'instant  $t$  en  $\vec{r}$  se fait au moyen d'une fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t)$ .
- ✗ La probabilité pour que la particule soit en  $\vec{r}$  à  $d\vec{r}$  près, à l'instant  $t$  est <sup>7</sup> :



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

Avec, pour la condition de normalisation :

$$\iiint_{\text{espace}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau = 1$$

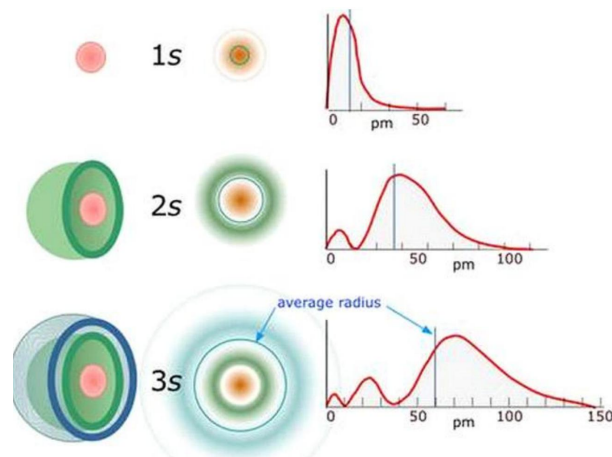
- ✗ Le caractère probabiliste et aléatoire ne résulte pas d'une mauvaise connaissance des conditions initiales (comme en théorie cinétique des gaz, par exemple), mais fait partie intégrante du formalisme quantique. Il n'y a pas d'autre élément dans le formalisme quantique qui pourrait permettre de savoir, avant de faire la mesure, où la particule va être détectée.

### III.1.c) Exemple de l'atome d'hydrogène

- ✗ L'électron dans l'atome d'hydrogène est soumis à un potentiel en  $1/r$  : on utilise donc les coordonnées sphériques pour décrire la fonction d'onde. Cette fonction d'onde se décompose en une partie radiale et une partie angulaire :

$$\varphi(\vec{r}, t) = R_{nl}(r) \times Y_{l,m_l}(\theta, \varphi)$$

- ✗ Premières fonctions d'onde radiales :



**Figure 23** – Densités de probabilités de présence pour un électron dans un atome d'hydrogène, en fonction de la distance au noyau. Simulation « tout est quantique » [ICI](#)

- ✗ Fonctions d'ondes angulaires :

7. Max Born 1926

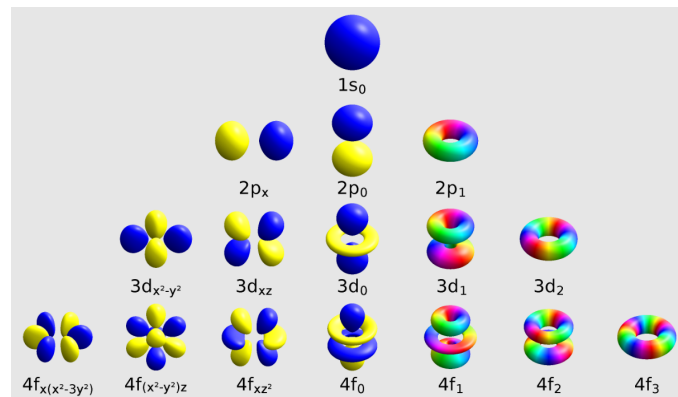


Figure 24

### III.2) Le principe de superposition

- ✗ On ne peut connaître l'état d'un système quantique avant de l'avoir mesuré.
- ✗ Tous les états compatibles avec les conditions physiques coexistent avant la mesure. Autrement dit, toute composition linéaire des solutions est solution : tous les états coexistent.
- ✗ Exemple le plus connu : Le paradoxe du chat de Schrödinger

Figure 25 – Vidéo : [ICI](#)

### III.3) Le principe de complémentarité (Niels Bohr, 1927)

- ✗ Un objet quantique est à la fois une onde et un corpuscule.
- ✗ Le comportement observé est celui qui est mis en évidence par les expériences : certaines expériences mettent en évidence son comportement corpusculaire, d'autres son comportement ondulatoire mais ces deux comportements ne sont que deux visions complémentaires du même objet.

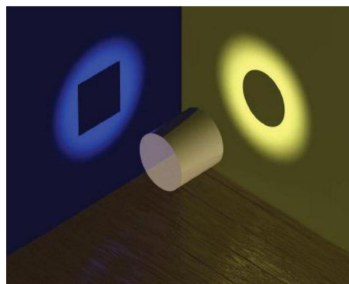


Figure 26

### III.4) Notion d'indétermination - Inégalités d'Heisenberg

#### III.4.a) Définition

- ✗ L'indétermination  $\Delta X$  sur une variable  $X$  est associée au fait qu'une mesure de cette variable ne donne pas un résultat certain mais un résultat aléatoire suivant une certaine loi de probabilité. Elle correspond à l'écart type :

$$\Delta X = \sqrt{\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2}$$

Où intervient l'opération de moyenne définie par :

$$\langle f(X) \rangle = \int_{D_X} f(X) dP(X)$$

Où  $D_X$  est l'ensemble des valeurs accessibles de  $X$

- ✗ Pour avoir accès expérimentalement à  $\Delta X$ , il faudrait pouvoir répéter, une même mesure  $N$  fois avec  $N \gg 1$  et ceci à un même instant :

$$\langle X \rangle_{mes} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$$

$$\Delta X_{mes} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \langle X \rangle_{mes})^2} = \sqrt{\langle X^2 \rangle_{mes} - \langle X \rangle_{mes}^2}$$

#### III.4.b) Le principe d'indétermination de Heisenberg spatiale

##### i) Principe

- ✗ La mesure, à un instant donné quelconque, de la position  $x$  et de la quantité de mouvement (l'impulsion)  $p_x$  sur l'axe  $(Ox)$  présentent des indéterminations fondamentales respectives.
- ✗ Elles sont notées  $\Delta x$  et  $\Delta p_x$  et vérifient l'inégalité spatiale d'Heisenberg<sup>8</sup> :

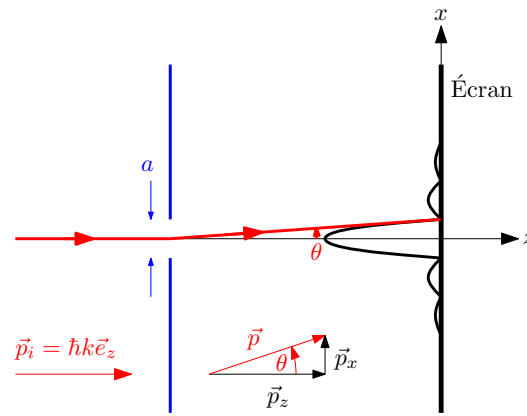
$$\Delta x \times \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

- ✗ Cette inégalité montre qu'un état quantique ne donne pas une connaissance parfaite de cet état du point de vue classique : la notion de trajectoire disparaît en mécanique quantique.

##### ii) Le principe d'indétermination de Heisenberg spatiale : Diffraction

- ✗ On considère la diffraction d'un faisceau lumineux par une fente fine de largeur  $a$ .

8. Attention : ces inégalités ne sont valables que en 1D



✘ Le photon est passé par la fente. On peut écrire :

$$\Delta x \approx a/2$$

✘ Le principe d'indétermination d'Heisenberg donne :

$$\Delta p_x \approx \frac{\hbar}{a}$$

✘ Or, sachant que :  $\sin \theta = \frac{\Delta p_x}{p}$ , avec  $p = \hbar k$ , on obtient :

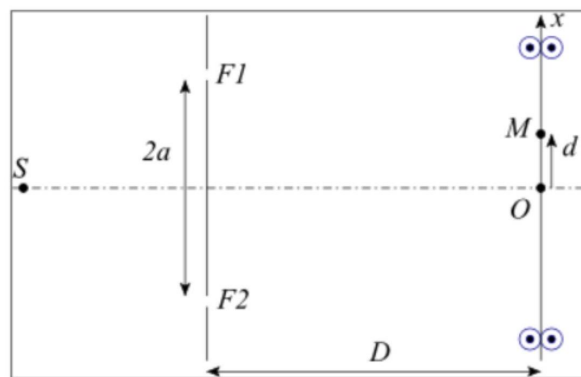
$$\sin \theta \approx \frac{\lambda}{2\pi a}$$

✘ Ce résultat est compatible avec celui obtenu avec une approche ondulatoire (diffraction) :

$$\sin \theta \approx \theta \approx \frac{\lambda}{a}$$

*Conclusion : la diffraction peut être interprétée grâce au principe d'incertitude d'Heisenberg.*

iii) Le principe d'indétermination de Heisenberg spatiale : Interférences



✘ Faisons une tentative pour détecter par où passe le quanton : on mesure simultanément le point d'impact  $x$  de la particule et la direction du recul de l'écran de l'axe vertical ( $Ox$ ).

$$\text{Chemin 1 : } p_x^{(1)} = \frac{x - \frac{a}{2}}{D} p_0$$

$$\text{Chemin 2 : } p_x^{(2)} = \frac{x + \frac{a}{2}}{D} p_0$$

✘ la différence entre les deux quantités de mouvements de recul est :

$$p_x^{(2)} - p_x^{(1)} = \frac{a}{D} p_0$$

✘ On mesure la translation de l'écran suivant ( $Ox$ ) suite à l'impact du quanton : on sait par quelle fente est passé le quanton si l'indétermination  $\Delta p_x$  sur l'écran est très inférieure devant  $p_{2x} - p_{1x}$ , soit :

$$\Delta p_{x, \text{écran}} \ll \frac{a}{D} p_0$$

✘ L'indétermination sur la position de l'écran est donnée par la relation d'Heisenberg :

$$\Delta x_{\text{écran}} \approx \frac{\hbar}{2\Delta p_{x, \text{écran}}} \gg \frac{D}{a} \frac{1}{p_0} \frac{\hbar}{2} = \frac{D}{a} \frac{\lambda_0}{h} \frac{h}{4\pi} = \frac{1}{4\pi} \frac{D}{a} \lambda_0$$

✘ L'interfrange étant  $i_0 = \frac{\lambda_0 D}{a}$ , on a :

$$\Delta x_{\text{écran}} \gg i_0$$

Il y a brouillage des franges !

**Conclusion :** *On peut faire une expérience où on sait par quelle fente passe la particule. On peut faire une expérience où on voit des interférences, mais on ne peut pas faire les deux à la fois !*

#### iv) Le principe d'indétermination de Heisenberg spatiale : L'atome d'hydrogène (Démonstration de R. Feynman)

✘ L'énergie potentielle de l'électron est ( $\langle r \rangle$  : valeur moyenne du rayon)

$$E_p = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \langle r \rangle}$$

✘ Le principe d'incertitude donne :

$$\Delta x \times \Delta p \approx \frac{\hbar}{2}$$

On obtient donc pour  $\Delta p$  :

$$\Delta p \approx \hbar / \langle r \rangle$$

✘ Pour  $E_c$  et  $E_m$ , on obtient donc :

$$E_c \approx \frac{p^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2m \langle r \rangle^2}$$

$$E_m \approx \frac{\hbar^2}{2m \langle r \rangle^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \langle r \rangle}$$

L'énergie mécanique est minimale ( $\frac{dE_m}{d\langle r \rangle} = 0$ ) pour :

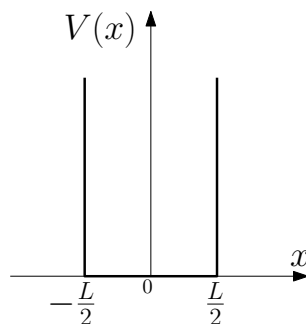
$$\langle r \rangle = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \approx 53pm$$

Et :

$$E_m \approx -\frac{m}{2\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = -13,6 \text{ eV}$$

**Conclusion :** *l'atome de Bohr, dans son état fondamental, peut-être étudié avec les inégalités d'Heisenberg<sup>9</sup>.*

v) Le principe d'indétermination de Heisenberg spatial : Puits de potentiel  $\infty$



✘ Un quanton matériel confiné ne peut qu'admettre une énergie cinétique minimale non nulle appelée énergie minimale de confinement. On étudie une particule dans une « boîte quantique » : L'énergie potentielle de la particule est infinie pour  $|x| > \frac{L}{2}$  et est nulle pour  $|x| \leq \frac{L}{2}$ . (on note  $L$  la largeur du puits de potentiel infini).

✘ Ici<sup>10</sup> :

$$\Delta x = \frac{L}{2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$$

et de même :

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle}$$

✘ Le principe d'indétermination s'écrit :

$$\Delta x \times \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

✘ D'où :

$$\sqrt{\langle p_x^2 \rangle} \geq \frac{\hbar}{L}$$

✘ L'énergie de la particule s'écrit :

$$E_m = \frac{p_x^2}{2m} \Rightarrow \langle E_m \rangle \geq \frac{\hbar^2}{2mL^2}$$

✘ On en déduit l'énergie minimale de la particule :

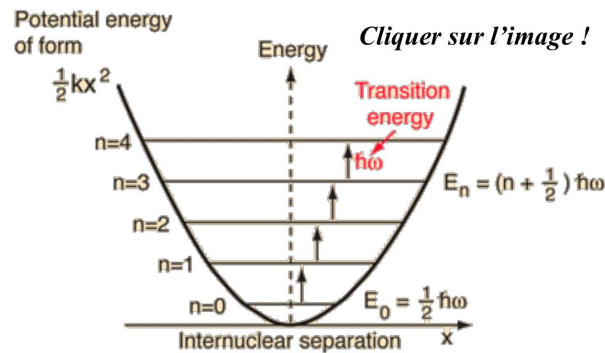
$$E_{\min} \approx \frac{(\Delta p)_{\min}^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2mL^2}$$

**Conclusion :** *Les inégalités d'Heisenberg permettent de déterminer l'énergie minimale de confinement.*

9. Voir Annexe

10. D'après la symétrie du puits, on a  $\langle x \rangle = 0$  et  $\langle p_x \rangle = 0$

## vi) Le principe d'indétermination de Heisenberg spatiale : Oscillateur harmonique



✘ L'oscillateur harmonique a un intérêt considérable en physique : tout système évoluant dans un potentiel au voisinage d'une position d'équilibre stable (donc un minimum de potentiel) peut être modélisé par un oscillateur harmonique pour les petites oscillations au voisinage de cette position d'équilibre.

✘ Indétermination sur  $x$ <sup>11</sup> :

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$$

✘ Indétermination sur  $p_x$  :

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2} = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle}$$

✘ Principe d'indétermination (saturé) :

$$\Delta x \times \Delta p_x \approx \frac{\hbar}{2}$$

✘ Énergie totale :

$$\langle E_m \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \langle x^2 \rangle + \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} = \frac{1}{2} m \omega^2 (\Delta x)^2 + \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2}$$

Cette énergie est minimale<sup>12</sup> pour :

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

Sa valeur étant :

$$E_{\min} = \frac{1}{2} \hbar \omega > 0$$

## III.4.c) Le principe d'indétermination de Heisenberg temporel

✘ Soit  $\Delta E$  l'indétermination sur la mesure d'une énergie  $E$  et  $\Delta t$  la durée de la mesure de cette l'énergie, alors :



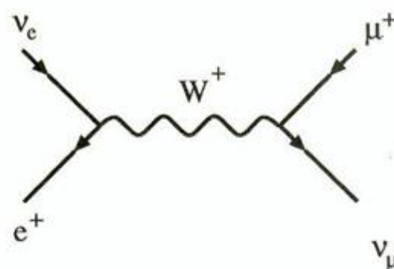
$$\Delta E \times \Delta t \geq \hbar$$

11. D'après la symétrie du puits, on a  $\langle x \rangle = 0$  et  $\langle p_x \rangle = 0$

12.  $\frac{d\langle E_m \rangle}{d(\Delta x)} = 0$

- ✘ Si l'interaction était de durée nulle, alors  $\Delta E$  serait infinie et l'énergie de la particule serait par conséquent indéterminée.
- ✘ A l'inverse, un état fondamental ayant une durée de vie infinie a une énergie parfaitement déterminée.
- ✘ Cette relation permet d'affirmer que le principe de conservation de l'énergie peut ne pas être vérifié d'une quantité  $\Delta E$  pendant une durée  $\Delta t$  telle que :  $\Delta E \times \Delta t \geq \hbar$
- ✘ On peut également, en s'appuyant sur ce principe, expliquer le concept des particules virtuelles, messagères des interactions fondamentales. Une telle particule de masse  $m$  (et d'énergie liée à sa masse,  $mc^2$ ) pourra exister pendant un temps  $\Delta t$  déterminé par le principe d'indétermination :

$$\Delta t \approx \frac{\hbar}{mc^2}$$



**Figure 27** – Diagramme de Feynman de l'interaction entre un positron et un neutrino électronique donnant un muon et un neutrino muonique : les traits obliques symbolisent les particules en mouvement et le trait ondulé représente la particule virtuelle échangée un boson  $W^+$  pendant  $\Delta t = \hbar/mc^2$

#### III.4.d) Conclusion sur le principe d'indétermination de Heisenberg

- ✘ L'expérimentateur fait partie de l'expérience : on ne peut jamais observer comment le système est « vraiment », autrement-dit, on ne connaît que la partie de la nature qui est révélée par nos expériences.
- ✘ Le principe d'indétermination impose une limite quantitative sur ce que l'on peut apprendre de la nature lors d'une interaction quelconque. La conséquence de cette limite est que l'on doit accepter l'interprétation probabiliste des phénomènes quantiques individuels.

Le principe de complémentarité de Bohr, le principe d'incertitude de Heisenberg et l'interprétation probabiliste de Born forment ensemble une interprétation cohérente de la mécanique quantique : c'est l'interprétation de Copenhague (1927).

### III.5) L'équation de Schrödinger (1926)

#### III.5.a) Équation de Schrödinger

- ✘ Une particule matérielle non relativiste sans spin placée dans un champ de force dérivant d'une énergie potentielle  $V(M, t)$ <sup>13</sup> admet pour équation dynamique de sa fonction d'onde l'équation de

13. En mécanique quantique, l'énergie potentielle est notée  $V$

Schrödinger<sup>14</sup> :

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

Cette équation s'écrit de manière simplifiée :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(M, t) = \hat{H} \psi(M, t)$$

Où :

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

est l'opérateur Hamiltonien.

### III.5.b) Équation de Schrödinger stationnaire

- ✘ On appelle état stationnaire, l'état quantique caractérisé par une fonction d'onde pouvant s'écrire sous forme d'un produit de fonctions à variables séparées :

$$\psi(M, t) = \varphi(M) \times g(t)$$

- ✘ En injectant  $\psi(M, t)$  dans l'équation de Schrödinger, on obtient :

$$i\hbar \frac{dg}{dt} \psi(M) = -\frac{\hbar^2}{2m} g(t) \Delta \varphi(M) + V(M, t) \varphi(M) g(t)$$

, soit :

$$i\hbar \frac{dg}{g(t)} = \frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(M) + V(M, t) \varphi(M)}{\varphi(M)} = cste$$

- ✘ Sachant que  $cste/\hbar$  est homogène à une temps, on déduit que  $cste$  est homogène à une énergie que l'on note  $E$ . L'équation différentielle vérifiée par  $g(t)$  est donc de la forme :

$$\frac{dg}{dt} + \frac{iE}{\hbar} g(t) = 0$$

, d'où :

$$g(t) = g_0 \exp \frac{-iEt}{\hbar}$$

On en déduit l'équation différentielle vérifiée par  $\varphi(M)$  :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(M) + V(M, t) \varphi(M) = E \varphi(M)$$

14. Attention : le signe  $+i\hbar$  dans l'équation de Schrödinger est lié à la convention d'écriture des phases, en l'occurrence ici :  $i(kx - \omega t)$

Les états stationnaires de l'équation de Schrödinger dans le cas d'une énergie potentielle indépendante du temps s'écrivent, en notant  $E$  leur énergie :

$$\psi(M, t) = \varphi(M) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

Où la partie spatiale  $\varphi(M)$  de la fonction d'onde vérifie l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

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

Conséquences :

$$|\psi(M, t)|^2 = |\varphi(M)|^2$$

La densité de probabilité de présence d'un état stationnaire est indépendante du temps.

### III.6) Conditions de continuité sur $\psi(M, t)$ (Exigible)

La résolution de l'équation de Schrödinger fait intervenir les conditions de continuités sur  $\psi(M, t)$  :

✘ Cas d'un potentiel **continu et borné** (cas réel) :

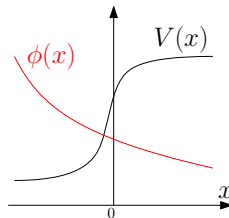


Figure 28

Alors :  $\varphi$  est **bornée, continue, 2 fois dérivable**.

✘ Cas d'un potentiel **discontinu et borné** (marche de potentiel) :

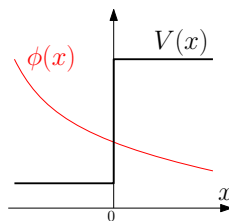


Figure 29

Alors :  $\varphi$  est **bornée, continue, 1 fois dérivable** ( $\varphi''(x)$  est discontinue)

✘ Cas d'un potentiel **discontinu, non borné** (mur de potentiel) :

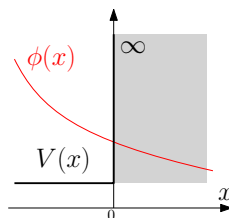


Figure 30

Alors :  $\varphi$  est **bornée, continue, non dérivable** ( $\varphi'(x)$  est discontinue)

### III.7) Vecteur densité de courant de probabilité

#### III.7.a) Définition

- ✘ Soit une particule matérielle de masse  $m$  décrite par la fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t)$ , alors le vecteur densité de courant de probabilité associé à cette onde de probabilité est <sup>15</sup> :

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \overrightarrow{\text{grad}} \psi - \psi \overrightarrow{\text{grad}} \psi^*)$$

- ✘ On note également  $\rho$  la densité de probabilité :

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

#### III.7.b) Équation de conservation

- ✘ L'équation de conservation de la probabilité vaut :

$$\text{div } \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

- ✘ Pour démontrer cette relation, calculons la divergence de  $\vec{j}$  :

$$\text{div } \vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\text{div} [\psi^* \overrightarrow{\text{grad}} \psi] - \text{div} [\psi \overrightarrow{\text{grad}} \psi^*])$$

Or <sup>16</sup> :

$$\text{div} [\psi^* \overrightarrow{\text{grad}} \psi] = \psi^* \Delta \psi + \overrightarrow{\text{grad}} \psi^* \cdot \overrightarrow{\text{grad}} \psi$$

$$\text{div} [\psi \overrightarrow{\text{grad}} \psi^*] = \psi \Delta \psi^* + \overrightarrow{\text{grad}} \psi \cdot \overrightarrow{\text{grad}} \psi^*$$

D'où :

$$\text{div } \vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*)$$

- ✘  $\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*$  peut-être exprimé à l'aide de l'équation de Schrödinger et de son conjugué :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V \psi \quad (1)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + V \psi^* \quad (2)$$

En calculant  $\psi^* \times (1) - \psi \times (2)$ , on obtient :

$$i\hbar \left( \underbrace{\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}}_{\frac{\partial \psi \psi^*}{\partial t}} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \underbrace{\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*}_{\frac{2mi}{\hbar} \text{div } \vec{j}} \right)$$

D'où :

$$\text{div } \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

15. Cette formule n'est pas exigible

16. Rappel :  $\text{div}(a\vec{A}) = a \text{div } \vec{A} + \overrightarrow{\text{grad}}(a) \cdot \vec{A}$

### III.7.c) Cas d'un Quanton représenté par une OPPM(+)

✕ soit une particule matérielle de masse  $m$  décrite par la fonction d'onde :

$$\psi(x, t) = \varphi_0 \exp\left(i\left(\frac{px - Et}{\hbar}\right)\right)$$

et donc d'impulsion connue  $p$  et réelle<sup>17</sup>. Alors :

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \vec{e}_x$$

Soit :

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \left( \frac{ip}{\hbar} \psi \right) - \psi \left( \frac{-ip}{\hbar} \psi \right) \right) \vec{e}_x$$

Et donc :

$$\vec{j} = \frac{p}{2m} (\psi^* \psi + \psi \psi^*) \vec{e}_x$$

On en déduit, l'expression de  $\vec{j}$  dans le cas d'un quanton décrit par une OPPM(+)<sup>18</sup> :

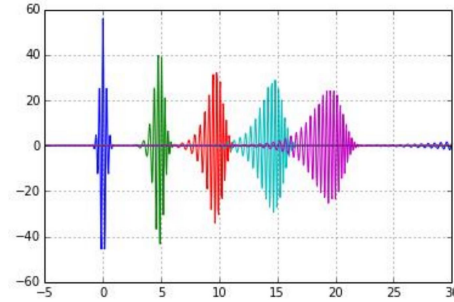
♥

$$\vec{j} = \frac{p}{m} |\psi|^2 \vec{e}_x = \rho \vec{V}$$

17. État non évanescent . Noter que le quanton est donc totalement délocalisé

18. Noter l'analogie avec les autres vecteur densité de courant !!

## IV Particule libre



**Figure 31** – Simulation de la propagation d'une particule libre

### IV.1) Modèle simpliste : Onde plane progressive

✘ Considérons le quanton libre d'impulsion  $\vec{p}$  et d'énergie  $E$  tels que :

$$\vec{p}(k) = \hbar k \vec{e}_x = m \vec{V} \text{ et } E(k) = \frac{p^2}{2m} = \hbar \omega(k)$$

décrit par la fonction d'onde :

$$\psi_0(x, t) = \varphi_0 e^{i(kx - \omega(k)t)}$$

✘ Cette OPPM(+) correspondant à :

- ☛ une onde plane progressive monochromatique se propageant à la vitesse de phase :  $v_\varphi = V = \frac{\omega(k)}{k}$
- ☛ Un quanton d'énergie parfaitement connue :

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

Il y a donc indétermination totale de la position du quanton : cette fonction d'onde proposée n'est pas normalisable <sup>19</sup>.

✘ Conclusion : la fonction d'onde  $\psi_0(x, t) = \varphi_0 e^{i(kx - \omega(k)t)}$  ne représente pas une situation physique concrète pour un quanton. Le modèle de l'OPPM(+) n'a pas de réalité physique en mécanique quantique.

### IV.2) Modèle du paquet d'onde

✘ Considérons le quanton libre d'impulsion  $\vec{p}$  et d'énergie  $E$  tels que :

$$\vec{p} = \hbar k \vec{e}_x = m \vec{V} \text{ et } E(p) = \frac{p^2}{2m} = \hbar \omega$$

décrit par la fonction d'onde <sup>20</sup> :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_l(p) \exp \frac{i(px - E(p)t)}{\hbar} dp$$

19.  $\int_D |\psi_0(x, t)|^2 dx = \int_D |\varphi_0|^2 dx$  n'est pas définie !

20. Avec :  $\varphi_l(p) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, 0) \exp^{ikx} dx$

La relation de dispersion est donc :

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

✘ La **vitesse de phase** est donc :

$$v_\varphi = \frac{\hbar k(\omega)}{2m} = f(\omega)$$

Il y a donc dispersion

✘ La **vitesse de groupe** est donc :

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k(\omega)}{m} = \frac{p}{m} = 2v_\varphi = g(\omega)$$

Il y a déformation du paquet d'onde au cours de la propagation. Cette vitesse de groupe n'a d'intérêt que pour un paquet d'onde localisé dans l'espace et se dispersant peu : elle représente la vitesse  $V$  associée au quanton.

✘ Cette fonction d'onde proposée est normalisable<sup>21</sup> : les indéterminations sur  $x$  et  $p$  vérifient :

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

✘ La fonction d'onde reste de faible module : les ondes de probabilités du paquet d'onde sont en interférences quasi-destructives.

### IV.3) Vérification de l'équation de Schrödinger

✘ En considérant que l'on peut décrire la particule à l'aide d'une OPPM(+), On remarque que :

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \psi(x, t)$$

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} = \frac{ip}{\hbar} \psi(x, t) \quad \text{et} \quad \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi(x, t)$$

✘ L'énergie de la particule libre est :

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m \left( \frac{p}{m} \right)^2 \quad \text{soit} \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

✘ En multipliant par  $\psi(x, t)$  :

$$E\psi(x, t) = \frac{p^2}{2m} \psi(x, t)$$

D'où :

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

✘ **Conclusion : l'équation de Schrödinger est vérifiée pour une particule libre.**

21.  $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_l(p)|^2 dp = 1$

## IV.4) Recherche de solutions stationnaires

✘ Considérons le quanton libre d'impulsion  $\vec{p}$  et d'énergie  $E$  tels que :

$$\vec{p} = p\vec{e}_x$$

et,

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

✘ On cherche des solutions stationnaires sous la forme :

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \exp^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

✘ L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit donc :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} = E\varphi(x) \Rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2} + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{k^2} \varphi(x) = 0$$

✘ Les solutions de cette équation sont de la forme :

$$\varphi(x) = (\psi_{0+})e^{\frac{ipx}{\hbar}} + (\psi_{0-})e^{-\frac{ipx}{\hbar}}$$



- Les ondes  $\psi(x, t) = (\psi_{0\pm}) \times \exp^{i(\pm\frac{px}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar})}$  correspondent aux états stationnaires d'un quanton **libre**.
- $\psi(x, t) = (\psi_{0+}) \times \exp^{i(\frac{px}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar})}$  et donc  $\varphi(x) = (\psi_{0+}) \times \exp^{i(\frac{px}{\hbar})}$ , correspondent à une OPPM(+).
- $\psi(x, t) = (\psi_{0-}) \times \exp^{i(-\frac{px}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar})}$  et donc  $\varphi(x) = (\psi_{0-}) \times \exp^{i(-\frac{px}{\hbar})}$ , correspondent à une OPPM(-).

✘ Toutes les valeurs de  $E$  sont possibles : on parle de continuum d'énergies.

✘ Il y a deux états stationnaires possibles (et indépendants) pour une même valeur de  $E$  : on dit qu'il y a dégénérescence d'ordre 2

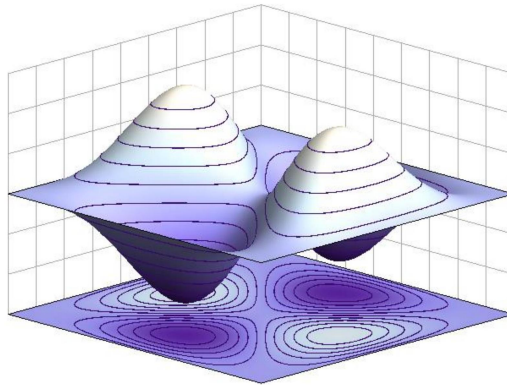
✘ Généralisation :



On dit qu'un niveau d'énergie est dégénéré  $d$  fois lorsque  $d$  états stationnaires linéairement indépendants sont possibles pour cette énergie.

✘ Attention ! En mécanique classique, les solutions stationnaires sont des ondes stationnaires alors qu'en mécanique quantique, cela ne correspond pas à des ondes stationnaires mais à des ondes progressives (ou régressives) !

## V Puits de potentiel



**Figure 32** – Fonction d'onde antisymétrique pour un état quantique de deux fermions identiques dans une boîte à une dimension

### V.1) Vérification de l'équation de Schrödinger

- ✘ Considérons que la particule dans le puits peut être décrite par une OPPM(+). L'énergie de la particule est désormais :

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

- ✘ En multipliant par  $\psi(x, t)$  :

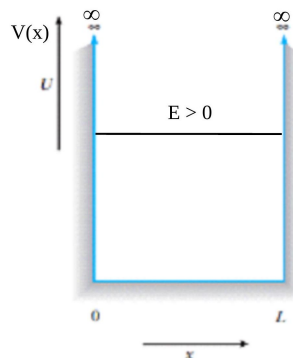
$$E\psi(x, t) = \frac{p^2}{2m}\psi(x, t) + V(x)\psi(x, t)$$

- ✘ D'où :

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

- ✘ Conclusion : on retrouve bien d'équation de Schrödinger pour une particule soumise au potentiel  $V(x)$ .

### V.2) Puits de potentiel rectangulaire infini



**Figure 33** – Particule dans un puits infini : [ICI](#)

### V.2.a) Recherche de solutions stationnaires

- ✘ Soit un quanton matériel d'énergie  $E = \hbar\omega > 0$  confiné dans une puits de potentiel de largeur  $L$ .
- ✘ L'équation de Schrödinger pour  $0 < x < L$  donne :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} = E\varphi(x) \Rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2} + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{k^2} \varphi(x) = 0$$

- ✘ On obtient des solutions sous la forme :

$$\varphi(x) = \underbrace{A \exp^{ikx}}_{OPPM(+)} + \underbrace{B \exp^{-ikx}}_{OPPM(-)}$$

- ✘ Les conditions aux limites<sup>22</sup> donnent :

$$\begin{aligned} \varphi(0) = 0 &= A + B \Rightarrow \varphi(x) = 2iA \sin kx \\ \varphi(L) = 0 &= 2iA \sin(kL) \quad \text{donc} \quad \sin(kL) = 0 \end{aligned}$$

On obtient :

$$k_n = \frac{n\pi}{L} \quad \text{et} \quad L = n \frac{\lambda}{2}$$

On retrouve les conditions d'existence d'ondes stationnaires (corde, tuyau acoustique...).

### V.2.b) Quantification de l'énergie

- ✘  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$  donne :  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$
- ✘ Sachant que  $k = \frac{n\pi}{L}$ , on obtient :

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

Le confinement du quanton aboutit à la quantification de son énergie

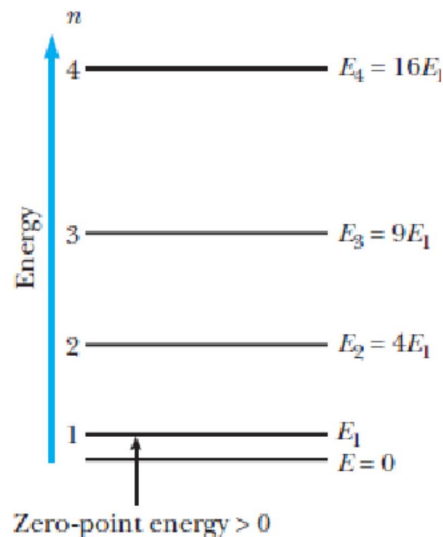


Figure 34

22. Attention! Ne pas appliquer  $\frac{d\varphi}{dx} = 0$  en  $x = 0$  ou  $L$  car  $V(x)$  n'est pas bornée!

✘ Ordres de grandeur :

- ☛ Un électron :  $L = 10^{-10}$  m :  $E_1 \approx 100$ eV
- ☛ Une bille d'acier :  $L = 1$  m ( $m = 30$  g) :  $E_1 \approx 10^{-66}$  J!! (Description classique suffisante)

### V.2.c) Fonction d'onde

✘ D'après ce qui précède, on a <sup>23</sup> :

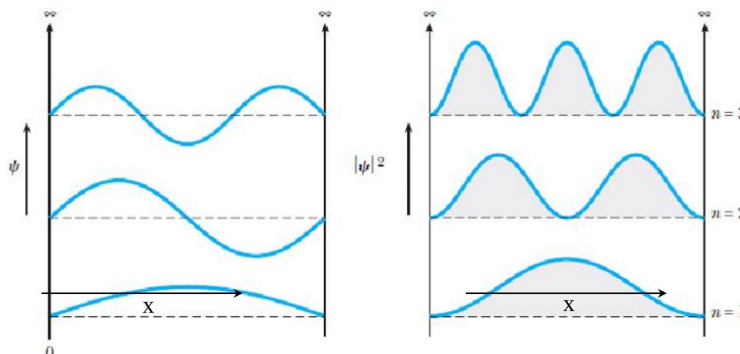
$$\varphi_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

✘ En utilisant la condition de normalisation :

$$\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = \int_0^L |\varphi_n(x)|^2 dx = A_n^2 \underbrace{\int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx}_{L/2} = 1$$

On trouve :

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



### V.2.d) Oscillations de Rabi

✘ Supposons qu'à  $t = 0$ , l'état de la particule soit décrit par la superposition de deux états stationnaires :

$$\psi(x, 0) = \alpha_n \varphi_n(x) + \alpha_m \varphi_m(x)$$

Soit :

$$\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{2}{L}} \alpha_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) + \sqrt{\frac{2}{L}} \alpha_m \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right)$$

✘ La particule étant dans la boîte à  $t = 0$ , on a <sup>24</sup> :

$$\int_0^L |\psi(x)|^2 dx = \int_0^L \left( \frac{2}{L} \alpha_n^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) + \frac{2}{L} \alpha_m^2 \sin^2\left(\frac{m\pi x}{L}\right) + \frac{4}{L} \alpha_n \alpha_m \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \right) dx \Rightarrow \alpha_n^2 + \alpha_m^2 = 1$$

✘ A un instant  $t$  quelconque, on aura donc :

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \alpha_n \varphi_n(x) \exp^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} + \sqrt{\frac{2}{L}} \alpha_m \varphi_m(x) \exp^{-i \frac{E_m t}{\hbar}}$$

23. On suppose les  $A_n$  réels, cela ne change pas grand chose au raisonnement

24. Calcul simple à faire. On pourra retenir que l'intégrale faisant intervenir le produit de deux sinus différents ( $n \neq m$ ) est systématiquement nulle : c'est l'orthogonalité des modes propres

soit :

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \alpha_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \exp^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} + \sqrt{\frac{2}{L}} \alpha_m \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \exp^{-i\frac{E_m t}{\hbar}}$$

On retrouve bien le fait que l'état de la particule n'est pas un état stationnaire car ne correspondant pas à une énergie unique. La conséquence directe est que la densité de probabilité est une fonction du temps : la probabilité que la particule soit dans l'état  $n$  (ou  $m$ ) est une fonction du temps :

$$\begin{aligned} |\psi(x, t)|^2 &= \frac{2}{L} \left( |\alpha_n|^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) + |\alpha_m|^2 \sin^2\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \right) \\ &+ \frac{2}{L} \left( \alpha_n \alpha_m \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \exp^{-i\frac{(E_n - E_m)t}{\hbar}} \right) \\ &+ \frac{2}{L} \left( \alpha_n \alpha_m \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \exp^{-i\frac{(E_m - E_n)t}{\hbar}} \right) \end{aligned} \quad (3)$$

D'où :

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{2}{L} \left( |\alpha_n|^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) + |\alpha_m|^2 \sin^2\left(\frac{m\pi x}{L}\right) + 2\alpha_n \alpha_m \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{(E_n - E_m)t}{\hbar}\right) \right)$$

De la forme :

$$|\psi(x, t)|^2 = A(x) + B(x) \cos\left(\frac{(E_n - E_m)t}{\hbar}\right)$$

Ainsi :

la probabilité que la particule soit dans l'état  $n$  (respectivement  $m$ ) oscille sinusoidalement au cours du temps à la pulsation dite de Rabi :

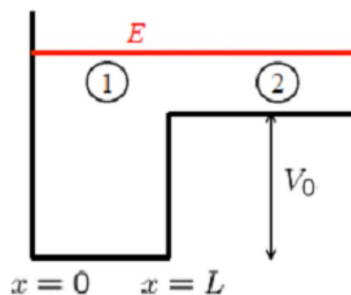
$$\omega = \frac{(E_n - E_m)}{\hbar}$$

✘ ODG : entre des deux premiers niveau de l'atome d'hydrogène, on trouve :

$$f = 5.6 \times 10^{15} \text{ Hz}$$

Ce qui correspond aux UV (Lyman)

### V.3) Puits de potentiel semi- infini



### V.3.a) Recherche des états stationnaires de diffusion ( $E > V_0$ )

✘ Conditions aux limites<sup>25</sup> :

$$\varphi(0) = 0$$

$$\varphi(L^-) = \varphi(L^+)$$

$$\left. \frac{d\varphi}{dx} \right)_{L^+} = \left. \frac{d\varphi}{dx} \right)_{L^-}$$

✘ Région (1) :

$$\frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2} + k^2\varphi_1(x) = 0 \quad (k = \sqrt{2mE}/\hbar)$$

$$\varphi_1(x) = \underbrace{A_1 \exp^{ikx}}_{OPPM(+)} + \underbrace{B_1 \exp^{-ikx}}_{OPPM(-)}$$

$$\varphi_1(0) = 0 \Rightarrow \varphi_1(x) = 2iA_1 \sin kx$$

✘ Région (2) :

$$\frac{d^2\varphi_2(x)}{dx^2} + K^2\varphi_2(x) = 0 \quad \left( K = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \right)$$

$$\varphi_2(x) = \underbrace{A_2 \exp^{iKx}}_{OPPM(+)} + \underbrace{B_2 \exp^{-iKx}}_{OPPM(-)}$$

✘ La fonction d'onde et sa dérivée sont continues en  $x = L$  :

$$\begin{cases} 2iA_1 \sin(kL) = A_2 \exp^{iKL} + B_2 \exp^{-iKL} \\ 2ikA_1 \cos(kL) = jK (A_2 \exp^{iKL} - B_2 \exp^{-iKL}) \end{cases}$$

✘ On obtient un système linéaire de 2 équations à 3 inconnues. Pour résoudre ce système, on peut supposer par exemple que la particule vient de l'infini à droite et donc que l'on connaît  $A_2$ . On peut alors déterminer les amplitudes  $A_1$  et  $B_2$  à partir du système d'équations. Notons que dans ce cas, dans une approche classique, la particule franchit le puits (en  $x = L$ ) dans 100% des cas et se réfléchit sur la barrière infinie (en  $x = 0$ ) pour repartir vers les  $x$  croissants (sans réflexion en  $x = L$ ) alors que dans le cas quantique, la probabilité de réflexion est possible dès l'arrivée de la particule en  $x = L$ .

25. Attention! On n'a pas  $\frac{d\varphi}{dx} = 0$  en  $x = 0$  car  $V(x)$  n'est pas bornée!

### V.3.b) Recherche des états stationnaires liés ( $E < V_0$ )

✘ Région (1) :

$$\frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2} + k^2\varphi_1(x) = 0 \quad (k = \sqrt{2mE}/\hbar)$$

$$\varphi_1(x) = \underbrace{A_1 \exp^{ikx}}_{OPPM(+)} + \underbrace{B_1 \exp^{-ikx}}_{OPPM(-)}$$

$$\varphi_1(0) = 0 \Rightarrow \varphi_1(x) = 2iA_1 \sin kx = A \sin kx$$

✘ Région (2) :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} - \alpha^2\varphi(x) = 0 \quad \left( \alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \right)$$

$$\varphi(x) = \underbrace{A_2 \exp^{-\alpha x}}_{\text{Onde évanescente}} + \underbrace{B_2 \exp^{+\alpha x}}_{\text{divergence}} = A_2 \exp^{-\alpha x}$$

✘ La fonction d'onde et sa dérivée sont continues en  $x = L$  :

$$\begin{cases} A \sin(kL) = A_2 e^{-\alpha L} \\ kA \cos(kL) = -\alpha A_2 e^{-\alpha L} \end{cases}$$

✘ En faisant le rapport membres à membres :

$$\alpha = -k \cotan(kL)$$

Soit :

$$\alpha L = -kL \cotan(kL)$$

✘ On remarque que :

$$\alpha^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

✘ Résolution graphique : on pose  $x = kL$  et  $y = \alpha L$  et on cherche les points d'intersection entre les deux courbes.

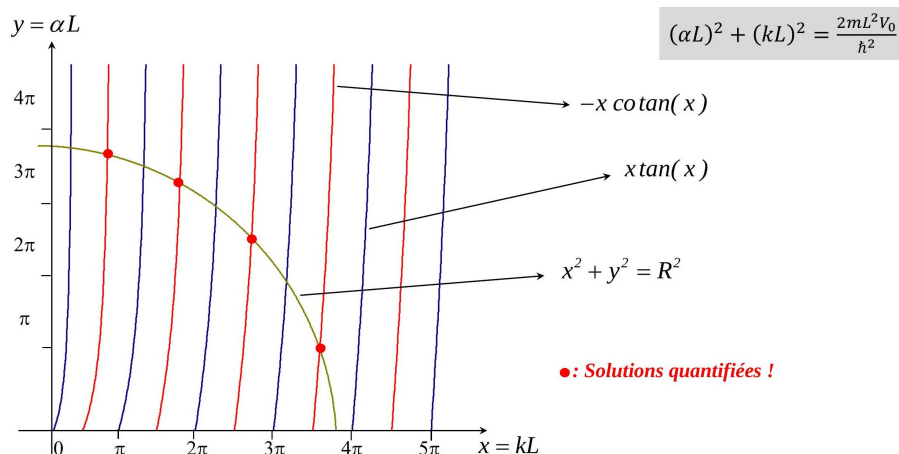


Figure 35 – Détermination des valeurs de  $kL$  (modes propres)

- ✘ Conclusion : on a un continuum d'états libres de diffusion pour  $E > V_0$  (pas de quantification) et un nombre fini d'états liés tels que  $0 < E < V_0$  (quantification).

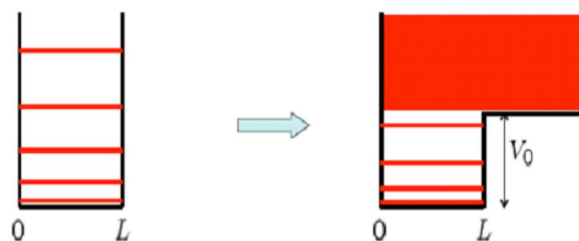


Figure 36

- ✘ Exemple : Modélisation de la force nucléaire entre un proton et un neutron

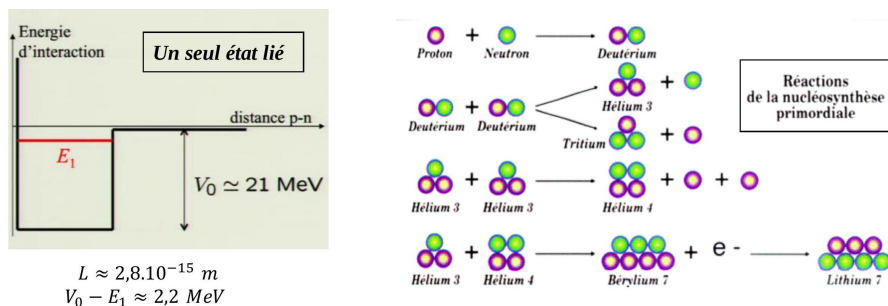
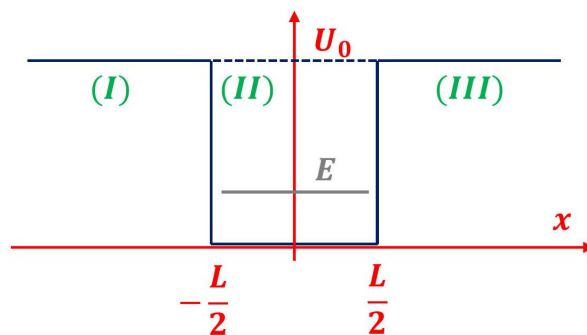


Figure 37

V.4) Puits de potentiel : Puits de potentiel de profondeur finie

Voir simulation phet : [ICI](#)

V.4.a) Recherche de solutions stationnaires dans le cas d'un état lié ( $0 < E < U_0$ )



i) Solutions générales

- ✘ Pour  $x < -\frac{L}{2}$  :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2} + U_0\varphi_1(x) = E\varphi_1(x)$$

Soit :

$$\frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2} - \alpha^2\varphi_1(x) = 0$$

avec :

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$

On ne garde que la solution non divergente :

$$\varphi_1(x) = \underbrace{A_1 \exp^{\alpha x}}_{\text{onde évanescente}}$$

✘ Pour  $x > \frac{L}{2}$  :

$$\varphi_3(x) = \underbrace{A_3 \exp^{-\alpha x}}_{\text{onde évanescente}}$$

✘ Pour  $-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}$  :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi_2(x)}{dx^2} = E\varphi_2(x)$$

Soit :

$$\frac{d^2\varphi_2(x)}{dx^2} + k^2\varphi_2(x) = 0$$

avec :

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

D'où :

$$\varphi_2(x) = \underbrace{A_3 \exp^{ikx}}_{OPPM(+)} + \underbrace{A_3 \exp^{-ikx}}_{OPPM(-)}$$

✘ Pour la suite, on cherche des fonctions d'ondes symétriques (paires) ou antisymétriques (impaires) :

$$\varphi_{\text{sym}}(-x) = \varphi_{\text{sym}}(x) \quad \text{ou} \quad \varphi_{\text{asym}}(-x) = -\varphi_{\text{asym}}(x)$$

## ii) États stationnaires pairs

✘ On a :

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= A_1 \exp^{\alpha x} \quad ; \quad \varphi_3(x) = A_1 \exp^{-\alpha x} \\ \varphi_2(x) &= A_2 \cos(kx) \end{aligned}$$

✘ Continuité de  $\varphi(x)$  et de  $\frac{d\varphi}{dx}$  en  $+L/2$  :

$$\begin{cases} A_1 \exp^{-\alpha L/2} = A_2 \cos(kL/2) \\ \alpha A_1 \exp^{-\alpha L/2} = k A_2 \sin(kL/2) \end{cases}$$

✘ Soit le système :

$$\begin{cases} \exp^{-\alpha L/2} A_1 - \cos(kL/2) A_2 = 0 \\ \alpha \exp^{-\alpha L/2} A_1 - k \sin(kL/2) A_2 = 0 \end{cases}$$

✘ Les solutions  $A_1$  et  $A_2$  seront non nulles si :

$$-\exp^{-\alpha L/2} k \sin(kL/2) + \alpha \exp^{-\alpha L/2} \cos(kL/2) = 0$$

soit,

$$\alpha = k \tan(kL/2)$$

## iii) États stationnaires impairs

✘ On part de :

$$\begin{aligned}\varphi_1(x) &= \underline{A}_1 \exp^{\alpha x}; \varphi_3(x) = -\underline{A}_1 \exp^{-\alpha x} \\ \varphi_2(x) &= \underline{A}_2 \sin kx\end{aligned}$$

✘ Un raisonnement similaire au cas pair conduit à :

$$\alpha = -k \cotan\left(\frac{kL}{2}\right)$$

## iv) Recherche des modes propres : méthode 1

✘ États stationnaires pairs :

On part de :

$$\alpha = k \tan\left(\frac{kL}{2}\right)$$

soit :

$$\frac{\alpha L}{2} = \frac{kL}{2} \tan\left(\frac{kL}{2}\right)$$

De plus,

$$\alpha^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

Entraîne :

$$\left(\frac{\alpha L}{2}\right)^2 + \left(\frac{kL}{2}\right)^2 = \frac{mL^2V_0}{2\hbar^2} = R^2$$

On pose :  $y = \frac{\alpha L}{2}$  et  $x = \frac{kL}{2}$ , alors :

$$\begin{aligned}x^2 + y^2 &= R^2 \\ y &= x \times \tan(x)\end{aligned}$$

✘ États stationnaires impairs :

$$\alpha = -k \cotan\left(\frac{kL}{2}\right)$$

Entraîne :

$$\frac{\alpha L}{2} = -\frac{kL}{2} \cotan\left(\frac{kL}{2}\right)$$

De même :

$$\alpha^2 + k^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2}$$

Entraîne :

$$\text{soit } \left(\frac{\alpha L}{2}\right)^2 + \left(\frac{kL}{2}\right)^2 = \frac{mL^2U_0}{2\hbar^2} = R^2$$

En posant :  $y = \frac{\alpha L}{2}$  et  $x = \frac{kL}{2}$ , on obtient alors :

$$\begin{aligned}x^2 + y^2 &= R^2 \\ y &= -x \times \cotan(x)\end{aligned}$$

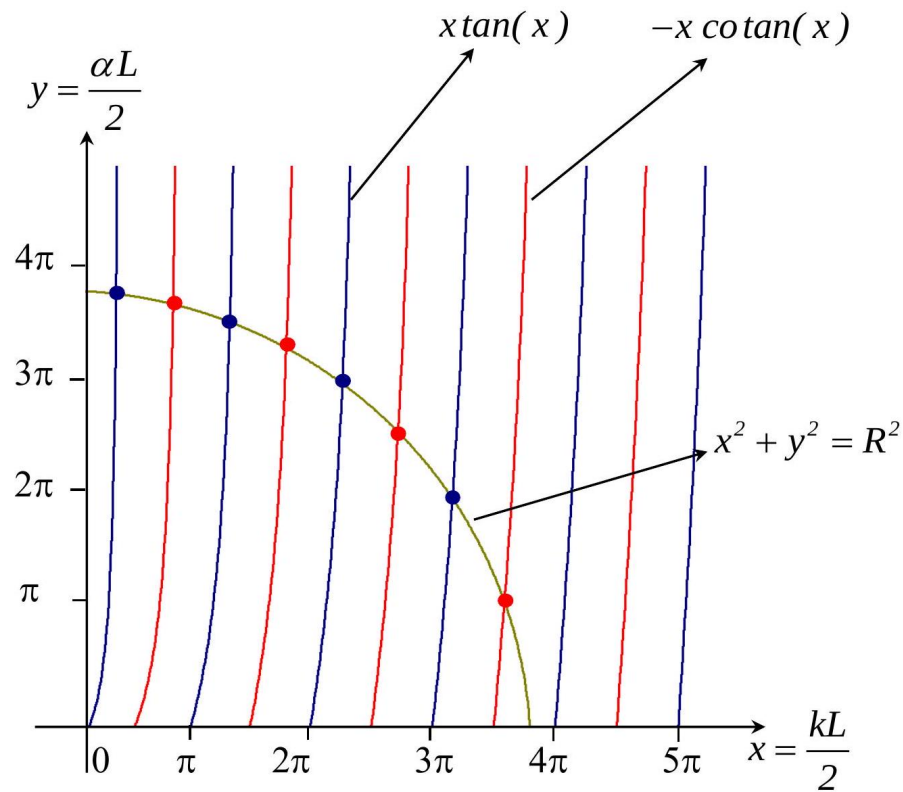


Figure 38 – En rouge les solutions paires et en bleu, les solutions impaires

### v) Recherche des modes propres : méthode 2

✕ États stationnaires pairs :

$$\alpha = k \tan\left(\frac{kL}{2}\right)$$

On doit avoir :

$$\tan\left(\frac{kL}{2}\right) > 0$$

donc :

$$n\pi < kL/2 < n\pi + \pi/2$$

Soit :

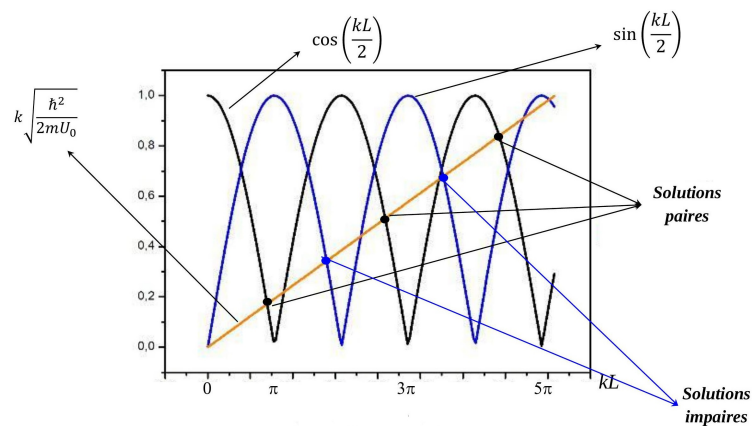
$$2n\pi < kL < (2n + 1)\pi$$

On remarque que :

$$\begin{aligned} \alpha^2 + k^2 &= k^2 \left( \tan^2\left(\frac{kL}{2}\right) + 1 \right) = \frac{2mU_0}{\hbar^2} \\ k^2 \frac{1}{\cos^2\left(\frac{kL}{2}\right)} &= \frac{2mU_0}{\hbar^2} \end{aligned}$$

D'où :

$$\left| \cos\left(\frac{kL}{2}\right) \right| = k \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0}}$$



✘ États stationnaires impairs :

$$\alpha = -k \cotan\left(\frac{kL}{2}\right)$$

On doit avoir :

$$\cotan\left(\frac{kL}{2}\right) < 0$$

donc :

$$(2n + 1)\pi < kL < (2n + 2)\pi$$

On remarque que :

$$\alpha^2 + k^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2}$$

soit :

$$\left(\frac{\alpha L}{2}\right)^2 + \left(\frac{kL}{2}\right)^2 = \frac{mL^2U_0}{2\hbar^2} = R^2$$

D'où :

$$\left|\sin\left(\frac{kL}{2}\right)\right| = k \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0}}$$

✘ Résolution graphique :

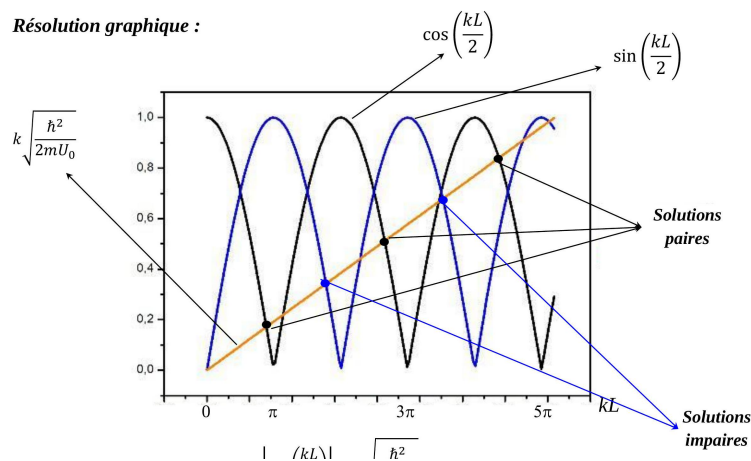
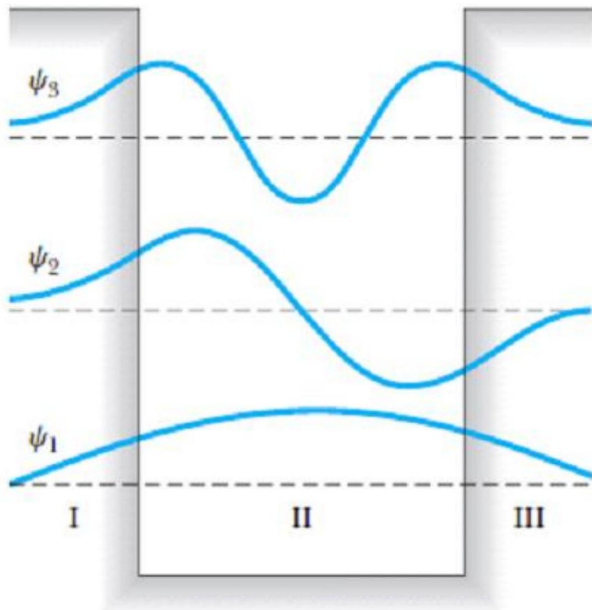
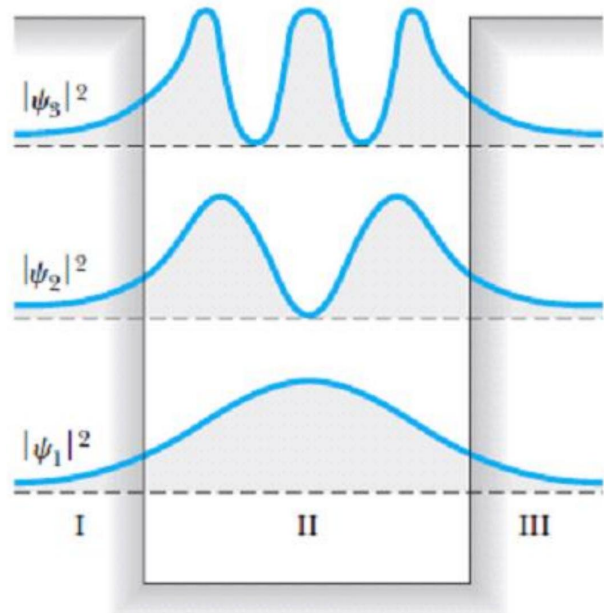


Figure 39 – Solutions impaires

- ✘ Connaissant les modes propres, on peut représenter les fonctions d'onde et les densités de probabilité correspondantes.



**Figure 40** – Fonction d'onde pour les trois états de plus basse énergie.



**Figure 41** – Densité de probabilité pour les trois états de plus basse énergie.

vi) Pourquoi se limiter aux états pairs et impairs (pour un potentiel pair) ?

- ✘ Soit  $\varphi(x)$  solution de l'équation de Schrödinger, ni paire ni impaire, pour une énergie  $E$ . On peut décomposer  $\varphi(x)$  sous la forme d'une fonction paire et d'une fonction impaire :

$$\varphi_{\text{sym}}(x) = \frac{\varphi(x) + \varphi(-x)}{\sqrt{2}}$$

$$\varphi_{\text{asym}}(x) = \frac{\varphi(x) - \varphi(-x)}{\sqrt{2}}$$

D'où :

$$\varphi(x) = \frac{\varphi_{\text{sym}}(x) + \varphi_{\text{asym}}(-x)}{\sqrt{2}}$$



Il n'existe pas d'autres états stationnaires que les états stationnaires symétriques et anti-symétriques déjà trouvés.

Ces deux fonctions  $\varphi_{\text{sym}}(x)$  et  $\varphi_{\text{asym}}(x)$  sont solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger et donc  $\varphi(x)$  également (par linéarité). Cependant,  $\psi(x, t)$  n'est pas une solution stationnaire. En effet, les fonctions d'onde paires et impaires ne correspondent pas aux mêmes énergies et la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \varphi_{\text{sym}}(x) e^{i\left(-\frac{E_{\text{sym}} t}{\hbar}\right)} + \varphi_{\text{asym}}(x) e^{i\left(-\frac{E_{\text{asym}} t}{\hbar}\right)} \right)$$

Correspond à une densité de probabilité fonction du temps : on observe des oscillations de Rabi.

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} \left( \varphi_{\text{sym}}^2(x) + \varphi_{\text{asym}}^2(x) + 2\varphi_{\text{sym}}(x)\varphi_{\text{asym}}(x) \exp^{i\Omega t} \right)$$

où :

$$\Omega = \frac{E_{\text{asym}} - E_{\text{sym}}}{\hbar}$$

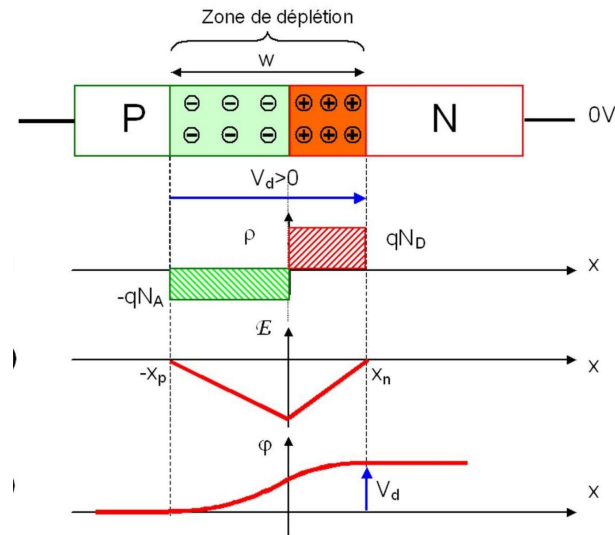
est la pulsation des oscillations.

## VI Marche de potentiel

Voir simulation Phet : [ICI](#)

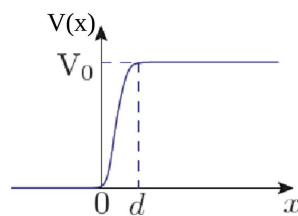
### VI.1) Exemples de marches de potentiel :

- ✗ Modélisation d'un électron de conduction dans un métal près de sa surface
- ✗ Courant électrique transitant entre deux conducteurs de potentiels différents
- ✗ Neutron qui rentre dans un noyau atomique



La jonction  $PN$  est un exemple simple de marche de potentiel

### VI.2) Recherche de solutions stationnaires



- ✗ En mécanique classique : On choisit un potentiel de la forme (on néglige la « montée »  $d$ ) :

$$x < 0 : V(x) = 0 \quad \text{et} \quad x > 0 : V(x) = V_0$$

- ✗ On considère une particule quantique venant de l'infini avec une énergie  $E > V_0$ <sup>26</sup>.

$$x < 0 : v = \sqrt{\frac{2E}{m}} \quad \text{et} \quad x > 0 : v = \sqrt{\frac{2(E - V_0)}{m}}$$

- ✗ On résout l'équation de Schrödinger :

26. Une particule classique a 100% de chance d'être transmise (avec une vitesse moindre)

$$x < 0 : -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_1(x)}{dx^2} = E \varphi_1(x)$$

$$\varphi_1(x) = \underbrace{A_1 e^{ik_1 x}}_{\text{OPPM}(+)} + \underbrace{B_1 e^{-ik_1 x}}_{\text{OPPM}(-)} \quad \text{avec } k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$x > 0 : -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} + V_0 \varphi_2(x) = E \varphi_2(x)$$

$$\varphi_2(x) = \underbrace{A_2 e^{ik_2 x}}_{\text{OPPM}(+)} + \underbrace{B_2 e^{-ik_2 x}}_{\text{OPPM}(-)} = A_2 e^{ik_2 x} \quad \text{avec } k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

En effet, il n'y a pas d'OPPM(-) pour  $x > 0$ .

✘ Conditions de passage : continuités de  $\varphi$  et de sa dérivée en  $x = 0$ .

$$\underline{A}_1 + \underline{B}_1 = \underline{A}_2 \quad \text{et} \quad k_1 (\underline{A}_1 - \underline{B}_1) = k_2 \underline{A}_2$$

✘ Coefficients de réflexion  $r$  et de transmission  $t$  :

$$r = \frac{\underline{B}_1}{\underline{A}_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad \text{et} \quad t = \frac{\underline{A}_2}{\underline{A}_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

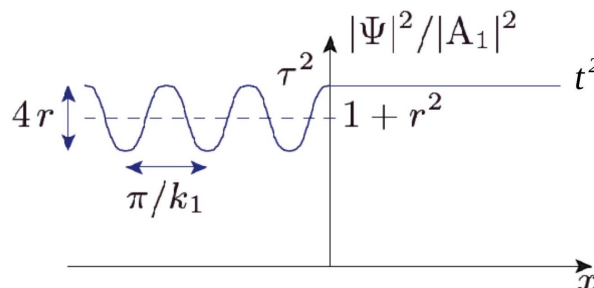
✘ Densités de probabilité :

**Onde de probabilité réfléchi :**

$$(x < 0) : |\varphi(x)|^2 = (1 + r^2 + 2r \cos(2k_1 x)) |\underline{A}_1|^2$$

**Onde de probabilité transmise :**

$$(x > 0) : |\varphi(x)|^2 = t^2 |\underline{A}_1|^2$$



### VI.3) Courant de probabilité

**Densité de courant de probabilité incident :**

$$\vec{J}_i = J_i \vec{u}_x = \frac{p_i}{m} |\underline{A}_1|^2 \vec{u}_x = \frac{\hbar k_1}{m} |\underline{A}_1|^2 \vec{u}_x$$

**Densité de courant de probabilité réfléchi :**

$$\vec{J}_r = J_r \vec{u}_x = -\frac{p_r}{m} |\underline{B}_1|^2 \vec{u}_x = -\frac{\hbar k_1}{m} |r \underline{A}_1|^2 \vec{u}_x$$

**Densité de courant de probabilité transmis :**

$$\vec{J}_t = J_t \vec{u}_x = \frac{p_t}{m} |\underline{A}_2|^2 \vec{u}_x = \frac{\hbar k_2}{m} |t \underline{A}_1|^2 \vec{u}_x$$

## VI.4) Coefficients de réflexion et de réflexion

Coefficient de probabilité de réflexion  $R$  :

$$R = \frac{|J_r|}{|J_i|} = r^2 = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$$

Coefficient de probabilité de transmission  $T$  :

$$T = \frac{|J_t|}{|J_i|} = \frac{k_2}{k_1} t^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

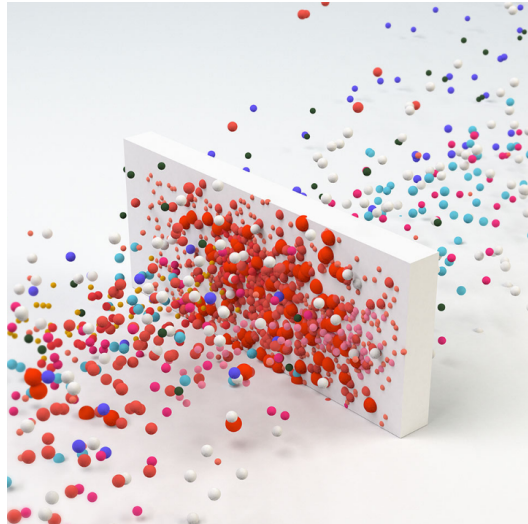


Un quanton est soit réfléchi soit transmis :

$$R + T = 1$$

## VII Barrière de Potentiel : l'effet tunnel

Voir simulation Phet : [ICI](#)



**Figure 42** – Si la barrière est assez fine, l'objet peut parfois passer à travers. Cliquez [ICI](#)

### VII.1) Approche ondulatoire

✕ Rappels :

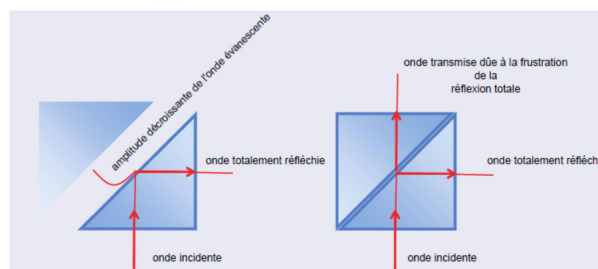
$$\sin i_2 = \frac{n_1}{n_2} \sin i_1$$

et

$$n_1 > n_2$$

implique que si  $i_1 > i_L$  alors on a a réflexion totale, avec :

$$\sin i_L = \frac{n_2}{n_1}$$



Dans le cas de gauche, l'onde est totalement réfléchi car l'onde évanescente est complètement absorbée avant d'atteindre le second prisme. Dans le cas de droite, l'onde évanescente se propage de nouveau dans le second prisme placé très proche du 1<sup>er</sup> (à une distance inférieure à la longueur d'onde du rayonnement utilisé). La réflexion totale est ainsi frustrée car une onde peut sortir du 1<sup>er</sup> prisme sans être réfléchi.

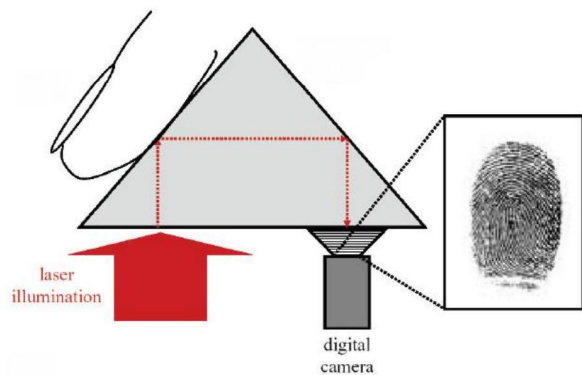


Figure 43 – Principe d'un capteur d'empreintes digitales : sujet CCS ICI

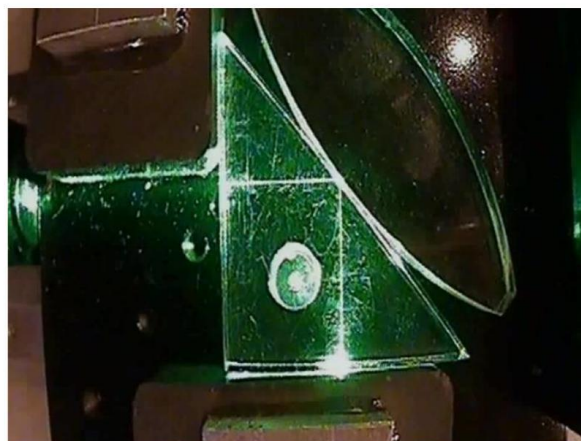
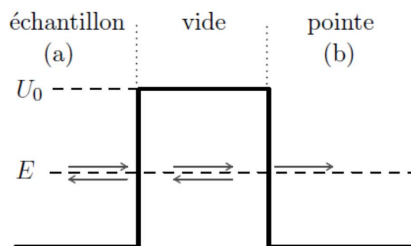
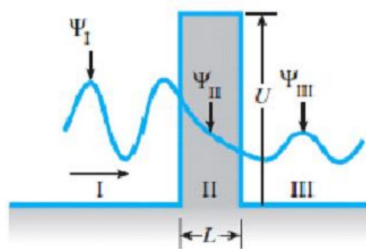


Figure 44

VII.2) Recherche de solutions stationnaires dans le cas où  $E < U_0$

27



✘ Les solutions de l'équation de Schrödinger se mettent sous la forme :

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= A \exp^{ikx} + B \exp^{-ikx} & (x < 0) \\ &C \exp^{\alpha x} + D \exp^{-\alpha x} & (0 < x < L) \\ &F \exp^{ikx} & (x > L) \end{aligned}$$

avec :

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

et

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$$

✘ La continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en  $x = 0$  et  $x = L$  donnent :

$$\begin{cases} A + B = C + D & \text{et } ik(A - B) = \alpha(C - D) \\ C \exp^{\alpha L} + D \exp^{-\alpha L} = F \exp^{ikL} & \text{et } \alpha(C \exp^{\alpha L} - D \exp^{-\alpha L}) = ikF \exp^{ikL} \end{cases}$$

Après calculs :

$$t = \frac{F}{A} = \frac{4}{\left(1 + \frac{i\alpha}{k}\right) \left(1 - \frac{ik}{\alpha}\right) \exp^{\alpha L} \exp^{ikL} + \left(1 - \frac{i\alpha}{k}\right) \left(1 + \frac{ik}{\alpha}\right) \exp^{-\alpha L} \exp^{ikL}}$$

27. Dans une approche classique, la particule a 100% de chance d'être réfléchi

✘ On se place dans le cas où :  $\alpha L \gg 1$ , soit  $\exp^{\alpha L} \gg \exp^{-\alpha L}$  :

$$t = \frac{F}{A} \approx \frac{4}{\left(1 + \frac{i\alpha}{k}\right) \left(1 - \frac{ik}{\alpha}\right) \exp^{\alpha L} \exp^{ikL}} = \frac{4e^{-\alpha L}}{2 + \frac{i\alpha}{k} - \frac{ik}{\alpha}} \exp^{-ikL}$$

✘ Le facteur de transmission T de la barrière de potentiel est :

$$T = \frac{|J_t|}{|J_i|} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \left| \frac{4 \exp^{-\alpha L}}{2 + \frac{i\alpha}{k} - \frac{ik}{\alpha}} \right|^2$$

$$T = \frac{16k^2\alpha^2}{(\alpha^2 + k^2)^2} \exp^{-2\alpha L}$$

$$T = \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2} \exp\left(-\frac{2L\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}\right)$$

Soit :

$$T = \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2} \exp\left(-\frac{2L\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}\right)$$

✘ On définit  $\delta$ , **distance caractéristique d'évanescence** :

$$\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - E)}}$$

alors :

$$T = \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2} \exp\left(-\frac{2L}{\delta}\right)$$

T diminue de manière exponentielle avec  $m$ ,  $L$  et  $U_0$

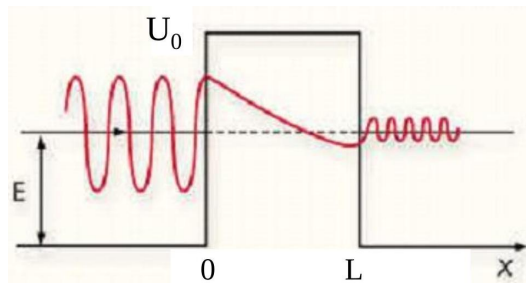


Figure 45 – Tracé de la densité de probabilité

✘ Quelques ODG :

- ☛ Pour un électron :  $U_0 = 1\text{eV}$  et  $L = 0,3 \text{ nm}$  :  $\delta = 0,3 \text{ nm}$  et  $T = 0,14$
- ☛ Pour un électron :  $U_0 = 1\text{eV}$  et  $L = 1 \text{ nm}$  :  $\delta = 0,3 \text{ nm}$  et  $T = 1,3 \cdot 10^{-3}$
- ☛ Pour un proton :  $U_0 = 1\text{eV}$  et  $L = 0,3 \text{ nm}$  :  $\delta = 7.10^{-12} \text{ m}$  et  $T = 6.10^{-38}!!$

### VII.3) Relation d'incertitude d'Heisenberg

✘ Utilisation de la relation d'indétermination temporelle :

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

✘ Soit  $E$  l'énergie de la particule, supposons que pendant un temps  $\Delta t$ , la particule ait une énergie :

$$E + \Delta E \geq V_0$$

Alors, elle peut passer au-dessus de la barrière avec une vitesse de l'ordre de :

$$v = \sqrt{\frac{2(E + \Delta E - U_0)}{m}}$$

pendant un temps  $\Delta t$  tel que :

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

✘ La particule quantique parcourt, pendant cette durée, la longueur :

$$\ell \approx v\Delta t = \sqrt{\frac{2(E + \Delta E - U_0)}{m}} \frac{\hbar}{\Delta E}$$

Cette longueur est maximale<sup>28</sup> pour  $\Delta E = 2(U_0 - E)$  et vaut :

$$\ell = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - E)}}$$

## VII.4) La radioactivité alpha

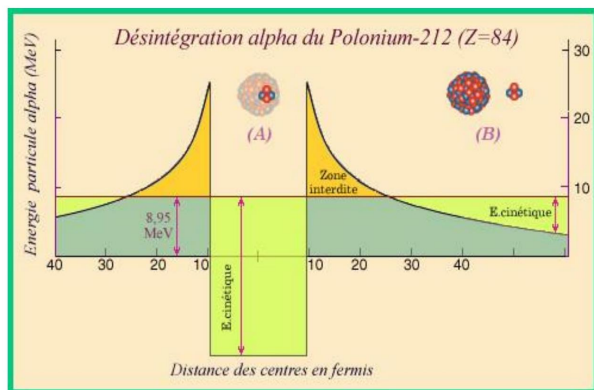


Figure 46

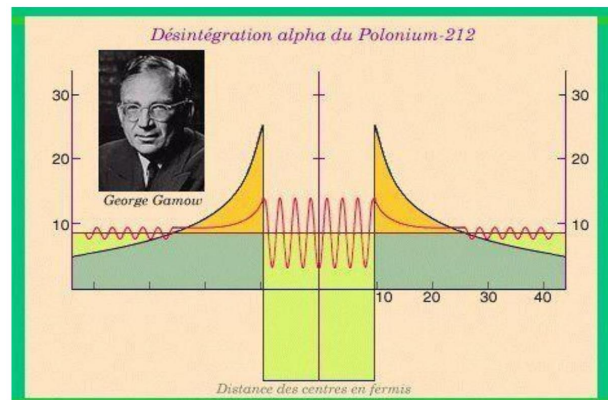
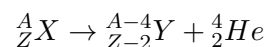


Figure 47

### VII.4.a) L'émission $\alpha$ : une réaction nucléaire

La radioactivité  $\alpha$  est l'émission d'une particule  $\alpha$  par un noyau lourd (noyau qui veut perdre des neutrons et des protons) :



28. On utilise :  $\frac{dl}{d(\Delta E)} = 0$

## i) Temps de demi-vie

- ✘ On considère un assemblée de noyaux  $X$ . On introduit  $N(t)$  le nombre de noyaux  $X$  n'ayant pas émis de particule  $\alpha$  et  $N_0$  de nombre de noyaux initial. Alors par définition, le **temps de demi-vie** est  $\tau_{1/2}$  tel que :

$$N(\tau_{1/2}) = \frac{N_0}{2}$$

- ✘ La loi de décroissance radioactive est un procédé linéaire d'ordre 1. Ainsi  $dP$ , la probabilité qu'un noyau émette une particule  $\alpha$  entre  $t$  et  $t + dt$  est de la forme :

$$dP = \lambda dt$$

Avec :

$$dP = -\frac{dN}{N(t)}$$

Où  $(-dN) > 0$  est le nombre d'atome émettant une particule  $\alpha$  entre  $t$  et  $t + dt$ .

- ✘ L'équation différentielle vérifiée par  $N(t)$  est donc :

$$\frac{dN}{dt} + \lambda N = 0$$

$N(t)$  vaut donc :

$$N(t) = N_0 \exp^{-\lambda t}$$

- ✘ On peut donc relier  $\lambda$  et  $\tau_{1/2}$  :

$$N(\tau_{1/2}) = N_0 \exp^{-\lambda \tau_{1/2}} = \frac{N_0}{2} \Rightarrow \tau_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}$$

ii) Energie  $E_\alpha$  de la particule  $\alpha$  émise

- ✘ Pour déterminer cette énergie, on utilise les **lois de conservation** : conservation de l'énergie totale et de l'impulsion.
- ✘ On note  $E_X$  et  $\vec{P}_X$ , l'énergie et la quantité de mouvement du noyau père  $X$  (considéré au repos dans le référentiel barycentrique du système). De même, on note  $E_Y$  et  $\vec{P}_Y$ , l'énergie et la quantité de mouvement du noyau fils  $Y$ . Enfin on note  $E_\alpha$  et  $\vec{P}_\alpha$ , l'énergie et la quantité de mouvement de la particule  $\alpha$ . On a donc :

$$\begin{aligned} E_X &= m_X c^2 \\ \vec{P}_X &= \vec{0} \\ E_Y &= m_Y c^2 + \frac{1}{2} m_Y V_Y^2 \\ \vec{P}_Y &= m_Y \vec{V}_Y \\ E_\alpha &= m_\alpha c^2 + \frac{1}{2} m_\alpha V_\alpha^2 \\ \vec{P}_\alpha &= m_\alpha \vec{V}_\alpha \end{aligned}$$

- ✘ La conservation de l'énergie totale donne :

$$E_X = E_Y + E_\alpha$$

Soit :

$$m_Y V_Y^2 + m_\alpha V_\alpha^2 = -2\Delta m c^2$$

Où :

$$\Delta m = m_Y + m_\alpha - m_X < 0$$

est appelé le **défaut de masse**.

✘ La conservation de l'impulsion du système donne :

$$\vec{P}_X = \vec{P}_Y + \vec{P}_\alpha$$

Soit :

$$m_Y V_Y = m_\alpha V_\alpha$$

✘ On combine les deux équations obtenues pour éliminer  $V_Y$  et exprimer  $V_\alpha$  :

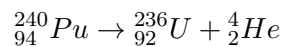
$$V_\alpha = \sqrt{\frac{-2 \frac{\Delta m}{m_\alpha}}{1 + \frac{m_\alpha}{m_Y}}} c$$

✘ On en déduit  $E_\alpha$  :

$$E_\alpha = \frac{-\Delta m c^2}{1 + \frac{m_\alpha}{m_Y}}$$

✘ Application numérique :

☛ On considère la réaction :



Attention : pour trouver un défaut de masse non nul, il faut prendre en compte un grand nombre de chiffres significatifs <sup>29</sup> :

$$m_{\text{Pu}} = 240.053\,813 \text{ u}$$

$$m_{\text{U}} = 236.045\,568 \text{ u}$$

$$m_\alpha = 4.001\,508 \text{ u}$$

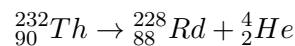
On trouve alors <sup>30</sup> :

$$\Delta m = -0.006\,736 \text{ u}$$

$$V_\alpha = 1.73 \times 10^7 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$$

$$E_\alpha = 6.19 \text{ MeV}$$

☛ Si on refait le calcul avec la réaction :



On trouve :

$$E_\alpha = 5.42 \text{ MeV}$$

On trouve le même ordre de grandeur et de manière générale, on constate que l'énergie de la particule  $\alpha$  émise varie peu.

29. Rappel :  $u$  est l'unité de masse atomique :  $u = 1.660\,538 \times 10^{-27} \text{ kg}$

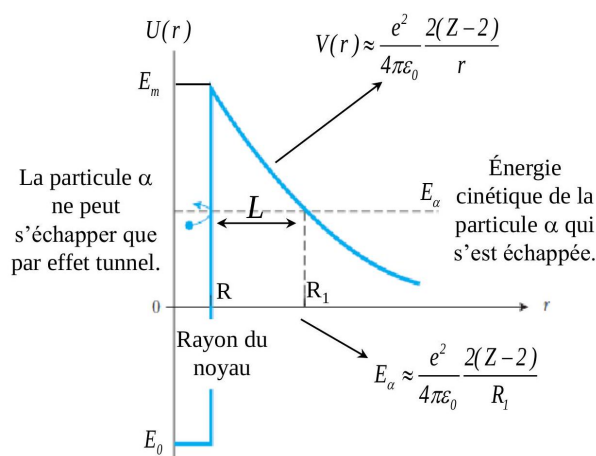
30. Rappel :  $1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$

## VII.4.b) Quelques ODG

- ✘ Énergie de la particule  $\alpha$  :  $E_\alpha$  entre 4 et 9MeV
- ✘ Demi-vie (période radioactive) :  $\tau_{1/2}$  entre  $10^{-6}$  et  $10^{+18}$  s.
- ✘ Ainsi, alors que l'énergie  $E_\alpha$  varie peu, le temps de demie-vie lui varie énormément. La loi empirique de Geiger et Nuttal (1911) propose la relation suivante entre  $E_\alpha$  et  $\tau_{1/2}$  :

$$\ln(\tau_{1/2}) = a + \frac{b}{\sqrt{E_\alpha}}$$

C'est plus tard que Gamow établit cette loi en considérant que la particule  $\alpha$  est émise par effet tunnel en se basant sur le modèle du noyau  $X$  ci-dessous :



Avec comme ODG :

$$E_0 = -40\text{MeV} \quad ; \quad E_m = 20\text{MeV}$$

Notons que l'on a bien  $E_\alpha < E_m$  : la particule  $\alpha$  sort bien par effet tunnel. On notera par la suite  $T$  la probabilité de traversé de la barrière.

VII.4.c) Relation entre  $\tau_{1/2}$  et  $T$ 

- ✘ La particule  $\alpha$ , d'énergie  $E_\alpha$ , lorsqu'elle est piégée dans le noyau, a une énergie cinétique qui vaut :

$$E'_\alpha = E_\alpha - (-E_0)$$

Sa vitesse est donc :

$$V'_\alpha = \sqrt{\frac{2(E_\alpha + E_0)}{m_\alpha}} > V_\alpha$$

En prenant :  $E_\alpha = 5 \text{ MeV}$  et  $E_0 = 40 \text{ MeV}$ , on trouve :

$$V'_\alpha = 4.74 \times 10^7 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$$

Ainsi, **la particule  $\alpha$  lorsqu'elle est plongée dans le noyau, est relativiste!** il faut donc revoir le calcul de sa vitesse

✘ En considérant la particule relativiste, on peut écrire :

$$E'_\alpha = (\gamma - 1)m_\alpha c^2 = E_\alpha - (-E_0)$$

Avec :

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{V_\alpha'^2}{c^2}}}$$

D'où :

$$V'_\alpha = c \sqrt{1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{E'_\alpha + E_0}{m_\alpha c^2}\right)^2}}$$

L'application numérique donne cette fois :

$$V'_\alpha = 3.27 \times 10^7 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$$

On est à la limite d'un comportement relativiste.

✘ Connaissant la vitesse  $V'_\alpha$ , on peut exprimer le **temps entre deux tentatives de sortie** (la particule  $\alpha$  est alors sur les bords du noyau) :

$$\tau_F = \frac{2R}{V'_\alpha}$$

$R$  étant le rayon du noyau :

$$R = R_0 A^{1/3} = 1,2 A^{1/3} \text{ (fm} = 10^{-15} \text{ m)}$$

On trouve donc, en ODG :

$$\tau_F = 4.56 \times 10^{-22} \text{ s} \Leftrightarrow f_F = 2.2 \times 10^{21} \text{ Hz}$$

✘ Soit  $dP$  la probabilité de franchissement de la barrière pendant un temps  $dt$  :

$$dP = \lambda dt = 1 - (1 - T)^{dN_F}$$

Où  $dN_F$  est le nombre de tentative pendant  $dt$  :

$$dN_F = \frac{dt}{\tau_F}$$

✘ Sachant que  $T \ll 1$ , on peut linéariser cette expression :

$$dP = T dN_F = \frac{T}{\tau_F} dt = \lambda dt$$

Sachant que  $\lambda = \frac{\ln 2}{\tau_{1/2}}$ , on trouve finalement :

$$\tau_{1/2} = \frac{\ln 2}{T} \tau_F$$

## VII.4.d) Modèle simpliste

- ✘ On assimile la barrière coulombienne à une barrière rectangulaire de largeur  $L$  et de hauteur  $E_m$ , avec :

$$L = R_1 - R$$

et,

$$R_1 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2(Z-2)}{E_\alpha}$$

- ✘ Le coefficient de transmission de la barrière est alors :

$$T(E_\alpha) \approx \frac{16E_\alpha(E_m - E_\alpha)}{E_m^2} \exp\left(-\frac{2(R_1 - R)}{\delta}\right)$$

Avec :

$$\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_\alpha(E_m - E_\alpha)}}$$

- ✘ La vitesse de la particule  $\alpha$  dans le noyau est de l'ordre de :

$$E_\alpha + E_0 = \frac{1}{2}m_\alpha V_\alpha'^2 \text{ soit } V_\alpha' = \sqrt{\frac{2(E_\alpha + E_0)}{m_\alpha}}$$

- ✘ Dans le noyau, la particule parcourt un diamètre  $2R$  en :

$$t_F = \frac{2R}{V_\alpha'}$$

- ✘ On déduit la relation suivante entre  $t_F$ ,  $\tau_{1/2}$  et  $T(E_\alpha)$  :

$$\tau_{1/2} = \frac{\ln 2}{T(E_\alpha)} t_F$$

Soit :

$$\ln(\tau_{1/2}) = \underbrace{\ln\left(\frac{R \ln(2) \sqrt{m_\alpha} E_m^2}{8 \sqrt{2(E_\alpha + E_0)} E_\alpha (E_m - E_\alpha)}\right)}_{A_0} + \frac{2(R_1 - R)}{\delta}$$

Lorsque  $E_\alpha$  varie,  $A_0$  varie peu et peut être considéré comme constante<sup>31</sup>. On a donc :

$$\ln(\tau_{1/2}) = A_0 + \frac{2\hbar}{\sqrt{2m_\alpha(E_m - E_\alpha)}} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2(Z-2)}{E_\alpha} - R \right)$$

Soit :

$$\ln(\tau_{1/2}) = \underbrace{A_0 - \frac{2R\hbar}{\sqrt{2m_\alpha(E_m - E_\alpha)}}}_A + \frac{2\hbar}{\sqrt{2m_\alpha(E_m - E_\alpha)}} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2(Z-2)}{E_\alpha} \right)$$

En considérant que le terme  $\sqrt{2m_\alpha(E_m - E_\alpha)}$  varie peu<sup>32</sup>, on obtient :

$$\ln(\tau_{1/2}) = A + \frac{B}{E_\alpha}$$

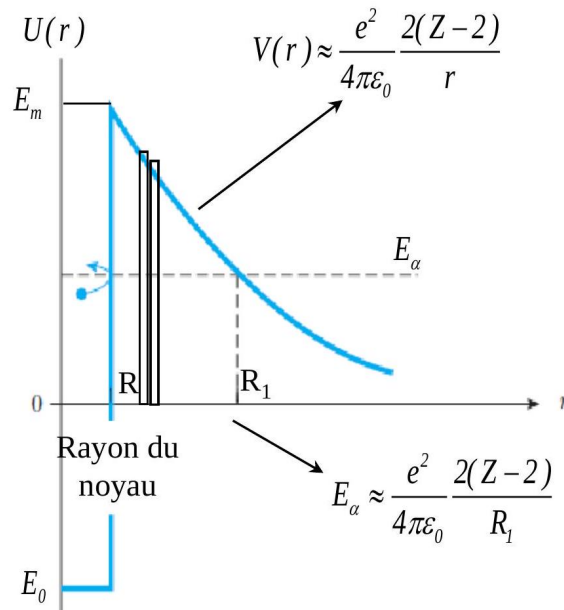
Le Modèle trop simpliste!

31. En effet,  $E_\alpha$  varie peu et le calcul de  $A$  fait intervenir un logarithme qui atténue ces faibles variations.

32. En effet,  $E_\alpha \ll E_m$

## VII.4.e) Modèle proposé par Gamow en 1928

- ✘ Approximation WKB (Wentzel, Kramers, Brillouin) : On approche le profil coulombien par une succession de barrières rectangulaires élémentaires de hauteur  $U(r)$  et d'épaisseur  $dr$ .



- ✘ Partons de l'expression de  $T$  pour une barrière épaisse de hauteur  $E_m$  et de largeur  $L$  :

$$T(E_\alpha) \approx \frac{16E_\alpha(E_m - E_\alpha)}{E_m^2} \exp\left(-\frac{2L}{\delta}\right)$$

- ✘ Le facteur pré-exponentiel variant peu et étant en ordre de grandeur inférieur à 4, on retiendra :

$$T \approx \exp\left(\frac{-2L}{\delta}\right)$$

- ✘ On considère la méso-barrière de largeur  $dr$ , la probabilité de transmission en  $r + dr$  est donc :

$$T(r + dr) = T(r) \times \exp\left(\frac{-2dr}{\delta}\right)$$

D'où :

$$\frac{dT}{T} = -\frac{dr}{\delta}$$

Avec :

$$\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_\alpha(U(r) - E_\alpha)}}$$

et :

$$U(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2(Z-2)e^2}{r}$$

(Barrière coulombienne entre la particule  $\alpha$  de charge  $2e$  et le noyau de charge  $(Z-2)e$ )

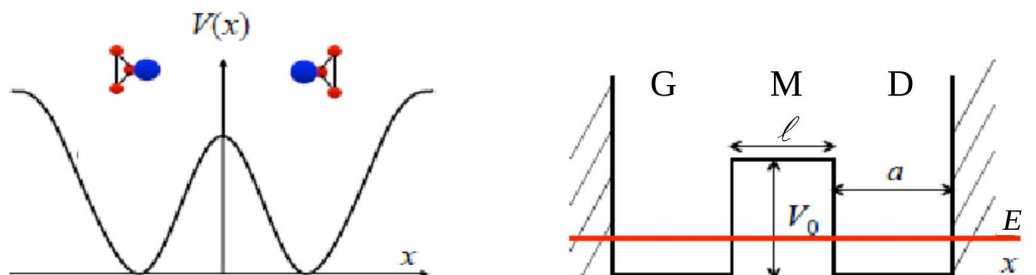
- ✘ Par intégration, on obtient :

$$\ln T = -2 \int_R^{R_1} \frac{1}{\delta} dr = -2 \int_R^{R_1} \frac{\sqrt{2m_\alpha(U(r) - E_\alpha)}}{\hbar} dr$$

Après calculs<sup>33</sup> :

$$\ln(T) = a + \frac{b}{\sqrt{E}} \quad \text{avec} \quad a = \frac{4}{\hbar} \sqrt{\frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0}} \sqrt{2mR} \quad \text{et} \quad b = -\frac{\pi}{\hbar} \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0} \sqrt{2m}$$

### VII.5) Molécule NH<sub>3</sub>



#### VII.5.a) Description

- ✗ Les atomes d'hydrogène sont aux sommets d'un triangle équilatéral.
- ✗ Il existe deux positions d'équilibre « stable » de l'atome d'azote, de part et d'autre de la barrière de potentiel. La molécule se retourne comme un parapluie en passant d'une position d'équilibre stable à une autre.
- ✗ Ordres de grandeur :

- ☛ La hauteur de la barrière de potentiel est :

$$V_0 = 0.25 \text{ eV} \approx 2 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$$

- ☛ La distance entre les deux puits est :

$$b = \frac{\ell + a}{2} = 40 \text{ nm}$$

- ☛ Energie d'agitation thermique à température ambiante :

$$E_{th} = k_B T \approx 2 \times 10^2 \text{ cm}^{-1} \ll V_0$$

⇒ le passage d'un puits à une autre se fait par effet tunnel

#### VII.5.b) Recherche de solutions stationnaires

- ✗ Modélisation du double puits de potentiel :

$$\begin{cases} 0 < |x| < \frac{\ell}{2} : & V(x) = V_0 \\ \frac{\ell}{2} < |x| < \frac{\ell}{2} + a : & V(x) = 0 \end{cases}$$

On s'intéresse aux niveaux d'énergie  $E < V_0$ .

- ✗ La particule quantique peut traverser la barrière par effet tunnel : son domaine accessible sera l'intervalle  $]-a - \frac{\ell}{2}; a + \frac{\ell}{2}[$ . Les deux puits de potentiel sont couplés par effet tunnel.

33. Voir annexe

✘ Le puits de potentiel est pair : on peut chercher des fonctions d'onde paires ou impaires.

$$\varphi(-x) = \varphi(x) \quad \text{ou} \quad \varphi(-x) = -\varphi(x)$$

On note<sup>34</sup> :

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{et} \quad \alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

✘ Région (G)<sup>35</sup>

$$\varphi_S(x) = \lambda \sin k \left( a + \frac{\ell}{2} + x \right)$$

$$\varphi_A(x) = -\lambda \sin k \left( a + \frac{\ell}{2} + x \right)$$

✘ Région (M) :

$$\varphi_S(x) = \mu \cosh(\alpha x)$$

$$\varphi_A(x) = \mu \sinh(\alpha x)$$

✘ Région (D) :

$$\varphi_S(x) = \varphi_A(x) = \lambda \sin k \left( a + \frac{\ell}{2} - x \right)$$

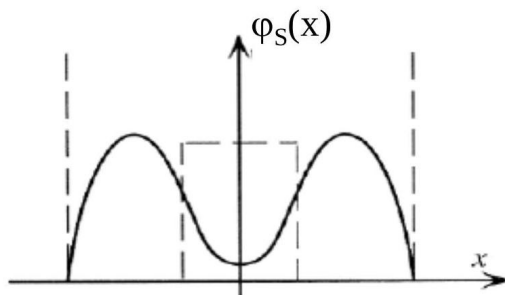


Figure 48

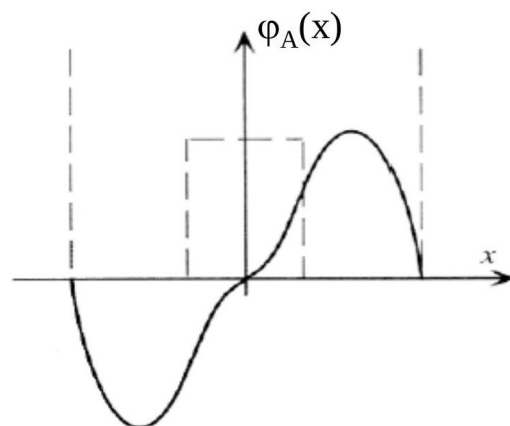


Figure 49

✘ La continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en  $x = \pm \frac{\ell}{2}$  donne les conditions :

$$\begin{cases} \tan(ka) = -\frac{k}{\alpha} \coth\left(\frac{\alpha\ell}{2}\right) & \text{(solution symétrique)} \\ \tan(ka) = -\frac{k}{\alpha} \tanh\left(\frac{\alpha\ell}{2}\right) & \text{(solution antisymétrique)} \end{cases}$$

✘ Et on a toujours :  $\alpha^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$

✘ Hypothèses simplificatrices :

- $V_0 \gg E$  soit  $\alpha \approx \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} = \text{cste}$
- $\alpha\ell \gg 1$  (valable pour  $\text{NH}_3$ )

Alors<sup>36</sup> :

$$\begin{cases} \tan(ka) \approx -\frac{k}{\alpha} (1 + 2e^{-\alpha\ell}) & \text{(solution symétrique)} \\ \tan(ka) \approx -\frac{k}{\alpha} (1 - 2e^{-\alpha\ell}) & \text{(solution antisymétrique)} \end{cases}$$

34. la masse  $m$  est la masse réduite de la molécule :  $3m_H m_N / (3m_H + m_N)$

35. Voir annexe

36. Pour le puits semi-infini de largeur  $a$ , on a :  $\tan ka = -k/\alpha$

## VII.5.c) Résolution graphique

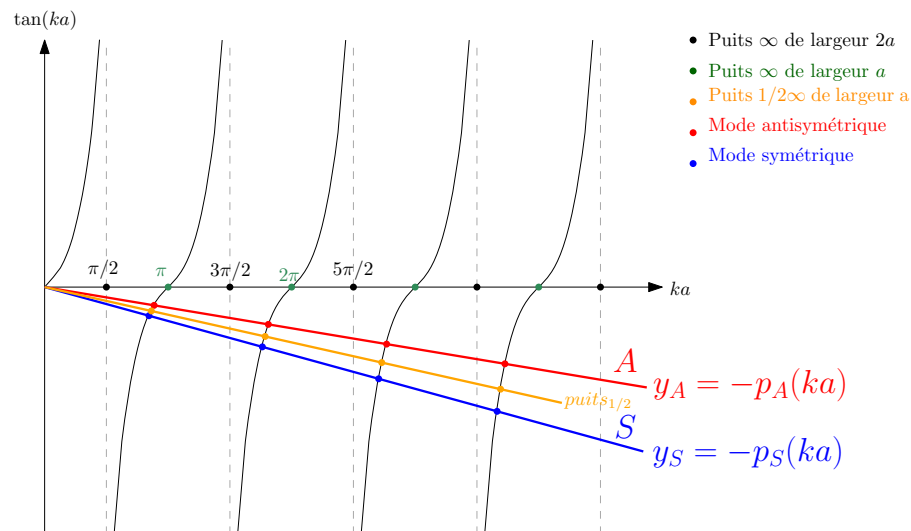
✘ On note :

$$y_S = -\frac{1}{\alpha a} (1 + 2e^{-\alpha \ell}) ka = -p_S(ka)$$

$$y_A = -\frac{1}{\alpha a} (1 - 2e^{-\alpha \ell}) ka = -p_A(ka)$$

Avec :  $p_A < p_S$

✘ On pose  $x = ka$  et on cherche donc les intersections des droites  $y_S = -p_S ka$  et  $y_A = -p_A ka$  avec  $\tan(ka)$ . Les valeurs quantifiées de  $k_n a$  sont les abscisses des intersections des branches successives de  $y = \tan(ka)$  avec les deux droites  $y_S$  et  $y_A$ . On peut les comparer avec les modes propres du puits infini de largeur  $a$  et du puits semi-infini de largeur  $a$ .



✘ On constate que (mode fondamental) :

$$k_{S,0} < k_{A,0}$$

Et, par conséquent :

$$E_{S,0} = \frac{\hbar^2 k_{S,0}^2}{2m} < E_{A,0} = \frac{\hbar^2 k_{A,0}^2}{2m}$$

⇒ L'état symétrique est le plus lié.

## VII.5.d) Puits infinis - puits demi-infinis découplés

✘ Soit un puits infini de largeur  $2a$  :

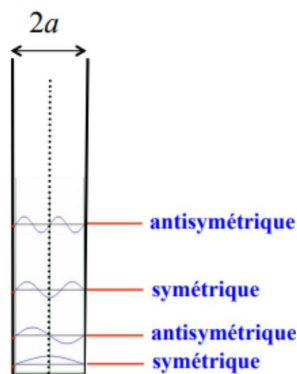


Figure 50 – puits infini de largeur  $2a$

✘ Soit deux puits semi-infinis découplés de largeur  $a$  :

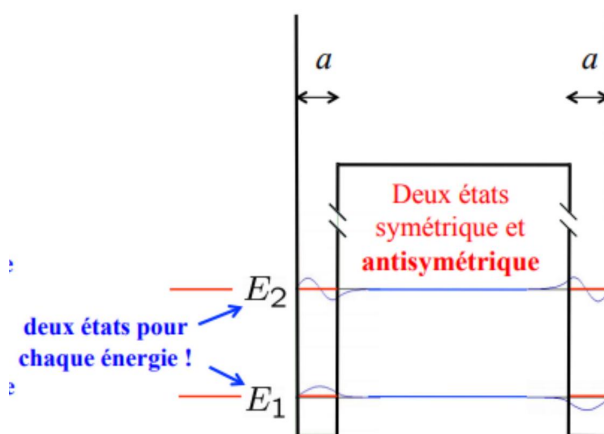


Figure 51 –  $E_1, E_2, \dots$  : niveaux d'un puits semi-infini de largeur  $a$

✘ Dans le puits semi-infini, il y a dégénérescence des niveaux d'énergie. Cette dégénérescence se lève quand on rapproche les deux puits ( $\Delta = \ell$  tend vers zéro) :

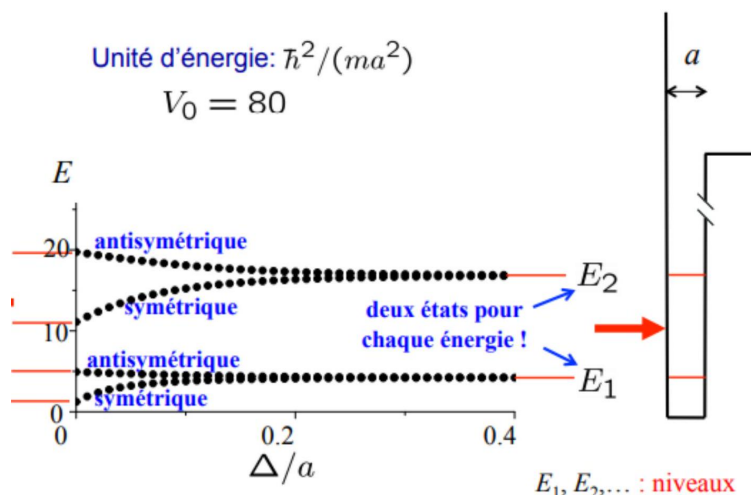


Figure 52 – Dégénérescence des niveaux d'énergie du puits semi-infini

### VII.5.e) Puits semi-infinis découplés et couplés

✘ Le couplage entre les deux puits semi-infinis lève la dégénérescence des niveaux d'énergie :

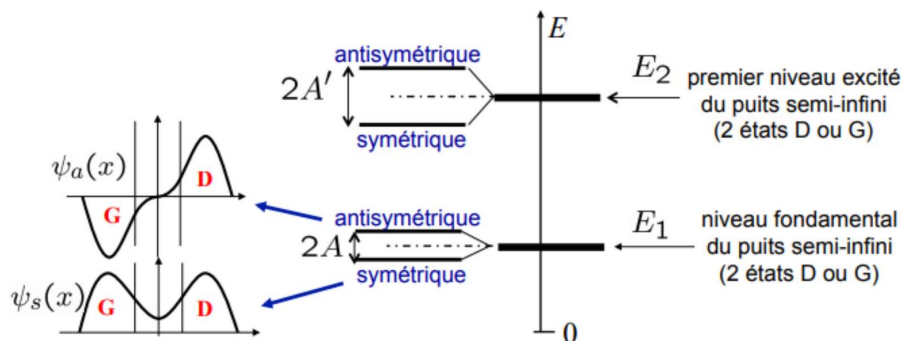


Figure 53 – puits découplés / puits couplés : levée de dégénérescence

- ✘ Soit  $2A$ , le clivage entre les deux états les plus bas :

$$E_A = E_1 - A$$

$$E_S = E_1 + A$$

Avec :

$$A = \frac{E_A - E_S}{2} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \frac{4}{\alpha a} e^{-\alpha l}$$

Si  $V_0 \gg E$  alors  $\alpha \approx \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar}}$  et  $\alpha l \gg 1$  et donc :

$$E_1 = \frac{E_A + E_S}{2} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left(1 - \frac{2}{\alpha a}\right)$$

$$A = \frac{E_A - E_S}{2} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \frac{4}{\alpha a} e^{-\alpha l}$$

- ✘ La différence d'énergie  $2A$  tend de manière exponentielle vers 0 lorsque la largeur  $l$  ou la hauteur de la barrière  $V_0$  augmentent. On se retrouve alors dans le cas de deux puits infinis découplés, de même énergie fondamentale.
- ✘ L'effet de couplage est d'une part d'abaisser l'énergie du fondamental (la particule quantique explore une zone de confinement plus large) et, d'autre part, de subdiviser le fondamental en deux niveaux d'énergie distincts<sup>37</sup>.

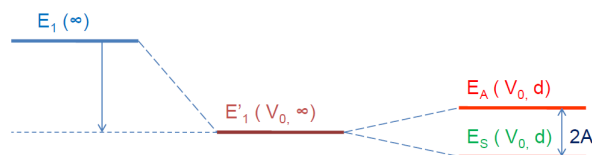


Figure 54 – Niveaux fondamentaux des trois puits

### VII.5.f) Oscillations de la molécule d'ammoniac

- ✘ On considère l'état initial suivant :

$$\psi_D(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_S(x) + \varphi_A(x)]$$

Cette fonction d'onde décrit un état où pratiquement toute la probabilité de présence de la particule est concentrée à droite : cet état n'est pas un état stationnaire d'énergie bien déterminée. Comment cet état évolue-t-il avec le temps ?

37.  $E_{1\infty}$  est le niveau d'énergie du puits infini de largeur  $a$  et  $E'_{1\infty}$  est le niveau d'énergie du puits semi-infini de largeur  $a$

✘ La fonction d'onde s'écrit :

$$\psi_D(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \varphi_S(x) e^{-iE_S t/\hbar} + \varphi_A(x) e^{-iE_A t/\hbar} \right] = \frac{e^{-iE_S t/\hbar}}{\sqrt{2}} \left[ \varphi_S(x) + \varphi_A(x) e^{-i(E_A - E_S)t/\hbar} \right]$$

✘ D'où la densité de probabilité :

$$|\psi_D(x, t)|^2 = \frac{1}{2} \left[ (\varphi_S(x))^2 + (\varphi_A(x))^2 + 2\varphi_S(x)\varphi_A(x) \cos\left(\frac{(E_A - E_S)t}{\hbar}\right) \right]$$

Ainsi la probabilité que l'atome d'azote soit à droite ou à gauche du plan des atomes d'hydrogène oscille au cours du temps à la fréquence (et à la période) :

$$v = \frac{E_A - E_S}{h} = 24\text{GHz} \quad T = \frac{1}{v} = 1,3 \cdot 10^{-10} \text{ s (MASER)}$$

Cette fréquence correspond aux ondes centimétriques.

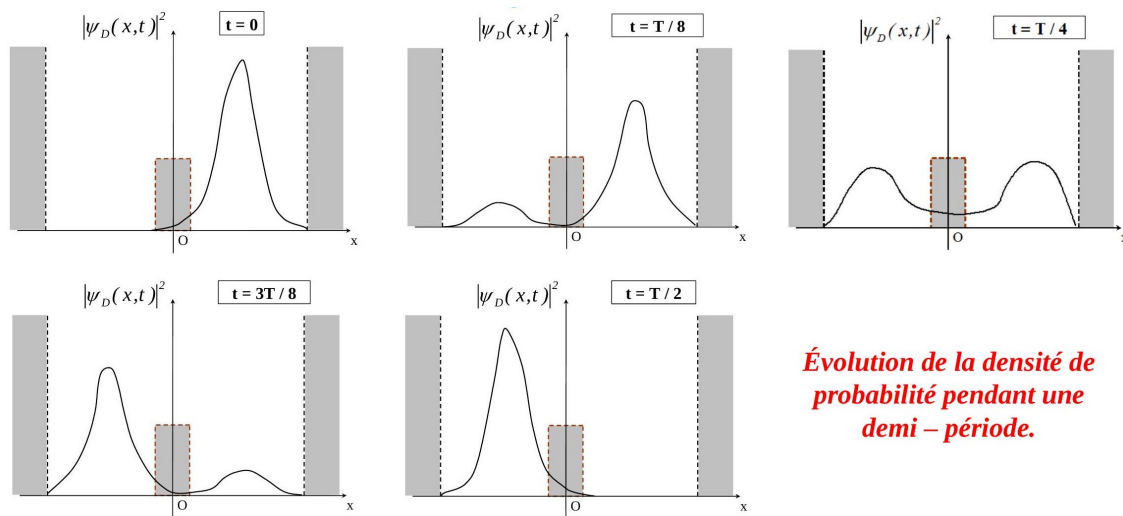


Figure 55 – Évolution de la densité de probabilité pendant une demi-période.

## VIII Annexes

### VIII.1) Calcul complet pour l'effet Compton

✘ Conservation de l'énergie totale :

$$\frac{hc}{\lambda} = \frac{hc}{\lambda'} + \frac{p^2}{2m}$$

Soit :

$$p^2 = 2mhc \left( \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right)$$

Soit enfin, sachant que  $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda \ll \lambda$  :

$$p^2 = 2mhc \frac{\Delta\lambda}{\lambda^2} \quad (4)$$

✘ Conservation de l'impulsion :

$$\frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'} \cos \theta + p \cos \varphi \quad (5)$$

$$0 = -\frac{h}{\lambda'} \sin \theta + p \sin \varphi \quad (6)$$

✘ On calcule (5)<sup>2</sup> + (6)<sup>2</sup> **APRES** avoir exprimé  $p \cos \varphi$  et  $p \sin \varphi$  :

$$\left( \frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda'} \cos \theta \right)^2 + \left( \frac{h}{\lambda'} \sin \theta \right)^2 = p^2$$

$$\left( \frac{h}{\lambda} \right)^2 + \left( \frac{h}{\lambda'} \right)^2 - 2 \frac{h^2}{\lambda \lambda'} \cos \theta = p^2$$

✘ En considérant à nouveau que  $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda \ll \lambda$ , et donc que  $\lambda^2 \approx \lambda'^2 \approx \lambda \lambda'$ , on obtient :

$$\frac{2h^2}{\lambda^2} (1 - \cos \theta) = p^2$$

✘ En égalisant les deux expressions trouvées pour  $p^2$ , on obtient alors directement :

$$\Delta\lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos \theta)$$

VIII.2) Exemples de raies d'émission pour l'hydrogène et les hydrogénoïdes

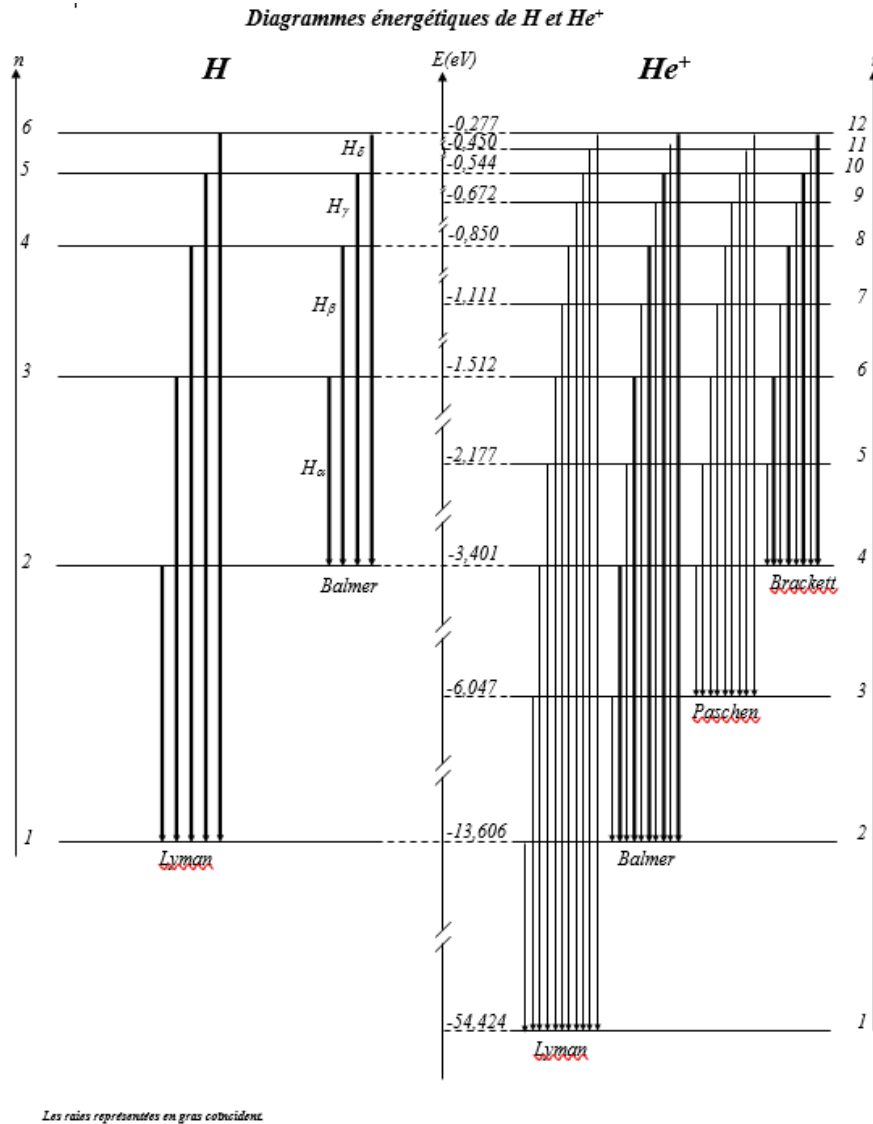


Figure 56

VIII.3) Énergie minimale de l'atome d'hydrogène : alternative au calcul de Feynman

On souhaite reprendre le calcul de manière plus rigoureuse. Pour cela, on introduit la fonction d'onde de l'électron correspondant à l'état fondamental :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) \times Y_{l,m_l}(\theta, \varphi) = 2 \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \times \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

✘ Détermination des valeurs de  $\langle r \rangle$ ,  $\langle r^2 \rangle$  et  $\langle \frac{1}{r} \rangle$

Définition de la valeur moyenne d'une fonction  $X(r)$  :

$$\langle X \rangle = \iiint_{\text{espace}} X(r) |\Psi|^2 d\tau = \int_{r=0}^{\infty} X(r) \left( \frac{\frac{4}{a_0^3} \exp^{-\frac{2r}{a_0}}}{4\pi} \right) 4\pi r^2 dr = \frac{4}{a_0^3} \int_{r=0}^{\infty} X(r) \exp^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 dr$$

D'où :

$$\langle r \rangle = \frac{4}{a_0^3} \int_{r=0}^{\infty} r \exp^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 dr = \frac{3}{2} a_0$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{4}{a_0^3} \int_{r=0}^{\infty} r^2 \exp^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 dr = 3a_0^2$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{4}{a_0^3} \int_{r=0}^{\infty} \frac{1}{r} \exp^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 dr = \frac{1}{a_0}$$

✘ Expression l'énergie moyenne de l'atome d'hydrogène.

$$\langle E_m \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle$$

Sachant que :

- $\langle p^2 \rangle = \langle p_x^2 \rangle + \langle p_y^2 \rangle + \langle p_z^2 \rangle = 3\langle p_x^2 \rangle$
- $\langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle = 3\langle x^2 \rangle$
- $(\Delta p_x)^2 = \langle p_x^2 \rangle$
- $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle$
- $\Delta x \times \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}$

On en déduit :

$$\langle p^2 \rangle = 3\langle p_x^2 \rangle = 3(\Delta p_x)^2 = \frac{3\hbar^2}{4(\Delta x)^2} = \frac{3\hbar^2}{4\langle x^2 \rangle} = \frac{9\hbar^2}{4\langle r^2 \rangle} = \frac{3\hbar^2}{4a_0^2}$$

D'où :

$$\langle E_m \rangle = \frac{3\hbar^2}{8a_0^2 m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0}$$

✘ détermination de  $a_0$ .

On minimise cette énergie :

$$\frac{d\langle E_m \rangle}{da_0} = -\frac{3\hbar^2}{4m_e a_0^3} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0^2} = 0 \Rightarrow a_0 = \frac{3\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$$

On est toujours dans le bon ordre de grandeur. Notons que l'on ne trouve pas la valeur attendue, car on a utilisé l'inégalité d'Heisenberg saturée.

#### VIII.4) Valeur moyenne en MQ (HP)

✘ Dans les inégalités d'Heisenberg, des valeurs moyennes interviennent dans le calcul de l'indétermination.

✘ Supposons que l'on connaisse  $\varphi(x, t)$ , alors la valeur moyenne d'une fonction  $f(x)$  vaut :

$$\langle f(x) \rangle = \int_D f(x) dP = \int_D f(x) |\psi(x, t)|^2 dx$$

✘ Supposons que l'on connaisse  $\varphi_p(p_x, t) = T.F[\psi(x, t)]$ , alors la valeur moyenne d'une fonction  $g(p)$  vaut :

$$\langle g(p) \rangle = \int_D g(p) dP = \int_D g(p) |\psi_p(p, t)|^2 dp$$

Attention :

$$\langle g(p) \rangle \neq \int_D g(p) dP = \int_D g(p) |\psi(x, t)|^2 dp$$

✘ Pour faire le calcul malgré tout, il faut utiliser la notion d'opérateur :

Grandeur	opérateur
$x$	$\hat{x} = x$
$p_x$	$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
$E_c = \frac{p_x^2}{2m}$	$\hat{E}_c = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$
$E_m = E_c + E_p$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$

✘ Le calcul des valeurs moyennes se fait alors comme suit :

$$\langle g(p) \rangle = \int_D \psi^*(x, t) g(\hat{p}) \psi(x, t) dx$$

• Valeur moyenne de  $p_x$  :

$$\langle p \rangle = \int_D \psi^*(x, t) \hat{p} \psi(x, t) dx$$

$$\langle p \rangle = \int_D \psi^*(x, t) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t) dx = -i\hbar \int_D \psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} dx$$

• Valeur moyenne de  $E_c$  :

$$\langle E_c \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_D \psi^*(x, t) \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} dx$$

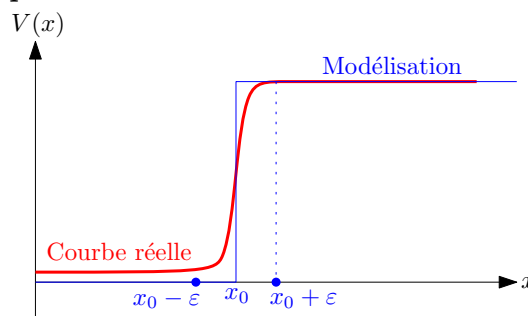
✘ Attention! lors d'une mesure, on n'obtient pas ces valeurs moyennes mais uniquement les valeurs propres des opérateurs. En revanche, si on fait la moyenne des valeurs obtenues pour une grandeur, on trouvera cette valeur moyenne.

### VIII.5) Continuités et discontinuités de $\psi$ et de ses dérivées (non exigible)

$x$  soit un quanton évoluant dans un espace 1D (Ox) et soumis à un potentiel  $V(x)$ . On note  $\psi(x, t)$  la fonction d'onde permettant de décrire les états du quanton. Les solutions stationnaires vérifient :

$$\begin{cases} \psi(x, t) = \varphi(x) e^{-iEt/\hbar} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + V(x) \varphi(x) = E \varphi(x) \end{cases}$$

✘ discontinuité finie du potentiel :



**Figure 57** – Modélisation de la marche finie de potentiel

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

$$d \left( \frac{d\varphi}{dx} \right) = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \varphi(x) dx$$

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} d\left(\frac{d\varphi}{dx}\right) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} (V(x) - E)\varphi(x)dx$$

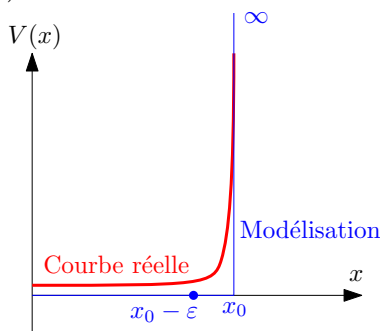
$$\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x_0+\varepsilon} - \left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x_0-\varepsilon} = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} (V(x) - E)\varphi(x)dx$$

quand  $\varepsilon \rightarrow 0$ , le terme de droite tend vers 0 et donc  $d\psi/dx$  est continue et à fortiori  $\varphi(x)$  aussi.

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2\varphi}{dx^2}\right)_{x_0+\varepsilon} &= \frac{2m}{\hbar^2} (V(x_0 + \varepsilon) - E)\varphi(x_0 + \varepsilon) \\ \left(\frac{d^2\varphi}{dx^2}\right)_{x_0-\varepsilon} &= \frac{2m}{\hbar^2} (V(x_0 - \varepsilon) - E)\varphi(x_0 - \varepsilon) \\ \Rightarrow \left(\frac{d^2\varphi}{dx^2}\right)_{x_0+\varepsilon} - \left(\frac{d^2\varphi}{dx^2}\right)_{x_0-\varepsilon} &= \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} [(V(x_0 + \varepsilon) - E)\varphi(x_0 + \varepsilon) - (V(x_0 - \varepsilon) - E)\varphi(x_0 - \varepsilon)] \\ \varepsilon \rightarrow 0 \Rightarrow \left(\frac{d^2\varphi}{dx^2}\right)_{x_0^+} - \left(\frac{d^2\varphi}{dx^2}\right)_{x_0^-} &= \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} [V(x_0^+) - V(x_0^-)]}_{\neq 0} \varphi(x_0) \end{aligned}$$

$\Rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2}$  est discontinue en  $x_0$

✘ discontinuité infinie de  $V(x)$  :



**Figure 58** – Modélisation de la marche infinie de potentiel

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

$$d\left(\frac{d\varphi}{dx}\right) = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)\varphi(x)dx$$

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0^+} d\left(\frac{d\varphi}{dx}\right) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0^+} (V(x) - E)\varphi(x)dx$$

$$\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x_0^+} - \left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x_0-\varepsilon} = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0^+} (V(x) - E)\varphi(x)dx$$

quand  $\varepsilon \rightarrow 0$ , le terme de droite ne tend pas vers 0 donc  $d\varphi/dx$  est discontinue et à fortiori  $d^2\varphi/dx^2$  aussi.

Supposons  $V(x > 0) = V_0 > E \Rightarrow +\infty$ , alors les seules solutions acceptables sont de la forme :

$$\begin{cases} \varphi(x > 0) = Ae^{-\alpha x} \\ \text{avec } \alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \end{cases}$$

Alors :  $\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x>0} = -\alpha\varphi(x > 0)$

En prenant  $V_0 \rightarrow \infty$ , on est donc dans la situation où :

$$\underbrace{\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x>0}}_{\neq \infty} = -\underbrace{\alpha}_{\infty} \underbrace{\varphi(x > 0)}_{\rightarrow 0}$$

on a donc  $\varphi(x) = 0$  pour  $V(x > 0) \rightarrow \infty$

### VIII.6) États liés - État de diffusion

✘ Dans un cas classique, de potentiel newtonien, attractif :

$$V(r) = -\frac{k}{r}$$

on peut avoir deux type d'état :

- Un état lié si  $E < 0$  (électron lié à un noyau)
- Un état de diffusion si  $E > 0$  (Collision entre particules)

✘ En mécanique quantique, on retrouve cette notion avec en plus la notion de quantification :

- État lié : les niveaux d'énergie sont quantifiés et en nombre fini. La fonction d'onde tend vers 0 quand on « sort » de la zone du puits.
- État de diffusion : les niveaux d'énergie ne sont pas quantifiés  $\psi(\vec{r}, t)$  se comporte comme une superposition de d'OPPM ( $\pm$ ) (continuum d'énergies)

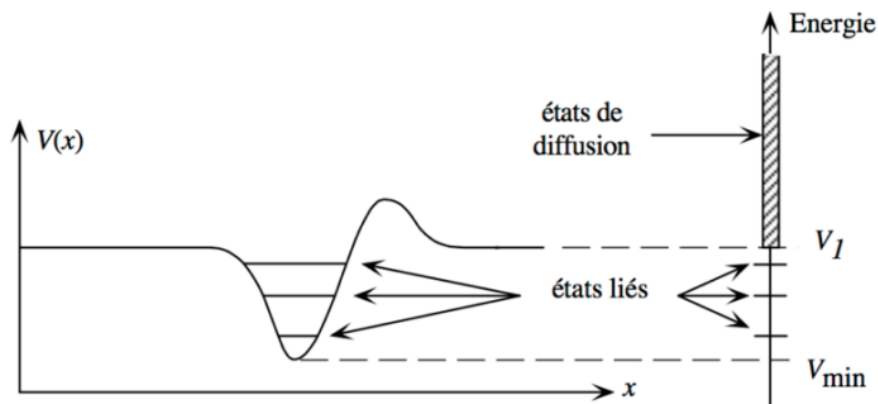
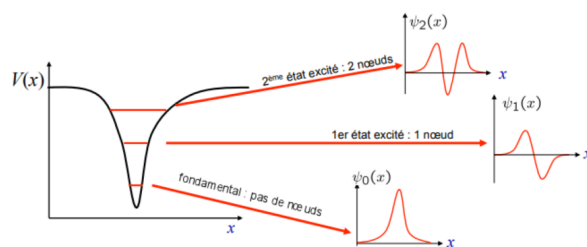


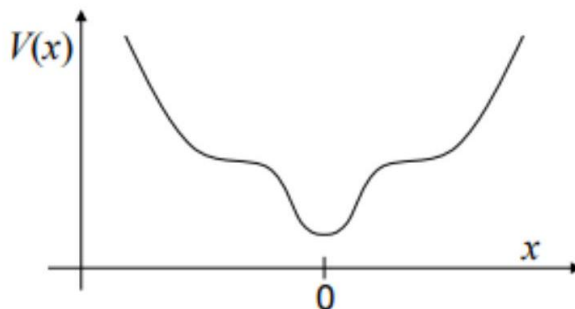
Figure 59 – États de diffusion et états liés en mécanique quantique

### VIII.7) Le théorème de Sturm-Liouville (État lié)

Dans le cas d'un état lié, on peut classer les niveaux par valeur croissante de l'énergie en fonction du nombre de nœuds (points où le signe change) de la fonction d'onde.



### VIII.8) Puits de potentiel pair (État lié)



Dans le cas d'un potentiel  $V(x)$  symétrique par rapport à 0 :

$$V(x) = V(-x)$$

On peut chercher les états propres de  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$  sous forme de fonctions paires ou impaires.

$$\psi_{\text{paire}}(x) = \psi_{\text{paire}}(-x) \text{ et } \psi_{\text{impaire}}(x) = -\psi_{\text{impaire}}(-x)$$

Ainsi :

- ✘ Le fondamental est pair,
- ✘ Le premier état excité est impair,
- ✘ Le deuxième état excité est pair ...

### VIII.9) Radioactivité $\alpha$ : calcul complet

- ✘ On pose  $R_e$  l'abscisse qui vérifie  $V(x = R_e) = E_\alpha$ , on a donc

$$\frac{2Z'e^2}{4\pi\epsilon_0 R_e} = E_\alpha$$

- ✘ On a donc :

$$\begin{aligned}
\ln(T) &= -2 \int_R^{R_e} \frac{\sqrt{2m\alpha}}{\hbar} \sqrt{\frac{2Z'e^2}{4\pi\epsilon_0 x} - \frac{2Z'e^2}{4\pi\epsilon_0 R_e}} dx \\
&= -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{\frac{2Z'e^2}{4\pi\epsilon_0}} \int_R^{R_e} \sqrt{\frac{1}{x} - \frac{1}{R_e}} dx \\
&= -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{\frac{2Z'e^2}{4\pi\epsilon_0}} \int_R^{R_e} dx \sqrt{\frac{1}{x} - \frac{1}{R_e}} \\
&= -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{\frac{2Z'e^2}{4\pi\epsilon_0 R_e}} \int_R^{R_e} dx \sqrt{\frac{R_e}{x} - 1} \\
&= -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{E_\alpha} \int_R^{R_e} dx \sqrt{\frac{R_e}{x} - 1}
\end{aligned}$$

✘ On pose :

$$x = R_e y^2 \text{ et donc } dx = 2R_e y dy$$

On obtient :

$$\begin{aligned}
\ln(T) &= -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{E_\alpha} \int_{\sqrt{R/R_e}}^1 2R_e y dy \sqrt{\frac{1}{y^2} - 1} \\
&= -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} R_c \sqrt{E_\alpha} \int_{\sqrt{R/R_e}}^1 2 dy \sqrt{1 - y^2} \\
&= -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} R_e \sqrt{E_\alpha} \int_{\varphi_0}^{\pi/2} 2 \cos \varphi d\varphi \sqrt{1 - \sin^2 \varphi}
\end{aligned}$$

✘ On pose :

$$\begin{cases} y = \sin \varphi \\ dy = \cos \varphi d\varphi \\ \sqrt{R/R_c} = \sin \varphi_0 \end{cases}$$

On obtient donc :

$$\begin{aligned}
\ln(T) &= -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} R_c \sqrt{E_\alpha} \int_{\varphi_0}^{\pi/2} 2 d\varphi \cos^2 \varphi \\
&= -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} R_e \sqrt{E_\alpha} \int_{\varphi_0}^{\pi/2} d\varphi [1 + \cos(2\varphi)] \\
&= -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} R_e \sqrt{E_\alpha} \left[ \varphi + \frac{\sin(2\varphi)}{2} \right]_{\varphi_0}^{\pi/2} \\
&= -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} R_c \sqrt{E_\alpha} \left[ \frac{\pi}{2} - \varphi_0 + 0 - \frac{\sin(2\varphi_0)}{2} \right] \\
&\simeq -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} R_e \sqrt{E_\alpha} \left[ \frac{\pi}{2} - \varphi_0 - \frac{2\varphi_0}{2} \right]
\end{aligned}$$

✘ Sachant que :

$$\varphi_0 \ll 1 \text{ donc } \sin(2\varphi_0) \simeq 2\varphi_0$$

On obtient :

$$\begin{aligned}\ln(T) &\simeq -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} R_e \sqrt{E_\alpha} \left[ \frac{\pi}{2} - 2\varphi_0 \right] \\ &\simeq -\frac{\pi\sqrt{2m}}{\hbar} R_e \sqrt{E_\alpha} + \frac{4\sqrt{2m}}{\hbar} R_e \sqrt{E_\alpha} \sqrt{\frac{R}{R_e}} \\ &\simeq -\frac{\pi\sqrt{2m}}{\hbar} R_e \sqrt{E_\alpha} + \frac{4\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{R_e E_\alpha} \sqrt{R} \\ &\simeq -\frac{\pi\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{Z'e^2}{2\pi\varepsilon_0} \frac{1}{\sqrt{E_\alpha}} + \frac{4\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{\frac{Z'e^2}{2\pi\varepsilon_0}} \sqrt{R}\end{aligned}$$

✘ On obtient donc :

$$\ln(T) \simeq \frac{4e}{\hbar} \sqrt{\frac{mZ'}{\pi\varepsilon_0}} \sqrt{R} - \frac{Z'e^2}{\hbar\varepsilon_0} \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{1}{\sqrt{E_\alpha}}$$

### VIII.10) Ammoniac : calcul complet

On note :

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{et} \quad \alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

✘ Région (G) :

$$\varphi_G(x) = \underline{A}_G \exp^{ikx} + \underline{B}_G \exp^{-ikx}$$

Conditions aux limites, en  $x = -L/2 - a$  :

$$\varphi_G\left(-\frac{L}{2} - a\right) = 0 = \underline{A}_G \exp^{ik\left(-\frac{L}{2} - a\right)} + \underline{B}_G \exp^{-ik\left(-\frac{L}{2} - a\right)}$$

D'où :

$$\varphi_G(x) = \underline{A}_G \left[ \exp^{ikx} - \exp^{-2ik\left(\frac{L}{2} + a\right)} \exp^{-ikx} \right] \quad (7)$$

$$= \underline{A}_G \exp^{-ik\left(\frac{L}{2} + a\right)} \left[ \exp^{ikx} \exp^{ik\left(\frac{L}{2} + a\right)} - \exp^{-ik\left(\frac{L}{2} + a\right)} \exp^{-ikx} \right] \quad (8)$$

$$= \underbrace{\underline{A}_G \exp^{-ik\left(\frac{L}{2} + a\right)}}_{\lambda_G} \sin\left(kx + k\frac{L}{2} + ka\right) \quad (9)$$

$$(10)$$

✘ Région (D) :

$$\varphi_D(x) = \underline{A}_D \exp^{ikx} + \underline{B}_D \exp^{-ikx}$$

Conditions aux limites, en  $x = L/2 + a$  :

$$\varphi_D\left(\frac{L}{2} + a\right) = 0 = \underline{A}_D \exp^{ik\left(\frac{L}{2} + a\right)} + \underline{B}_D \exp^{-ik\left(\frac{L}{2} + a\right)}$$

D'où :

$$\varphi_D(x) = \underline{A}_D \left[ \exp^{ikx} - \exp^{2ik\left(\frac{L}{2}+a\right)} \exp^{-ikx} \right] \quad (11)$$

$$= \underline{A}_D \exp^{ik\left(\frac{L}{2}+a\right)} \left[ \exp^{ikx} \exp^{-ik\left(\frac{L}{2}+a\right)} - \exp^{ik\left(\frac{L}{2}+a\right)} \exp^{-ikx} \right] \quad (12)$$

$$= \underbrace{-\underline{A}_D \exp^{ik\left(\frac{L}{2}+a\right)}}_{\lambda_D} \sin\left(-kx + k\frac{L}{2} + ka\right) \quad (13)$$

$$(14)$$

✘ Région (M) :

$$\varphi_M(x) = \underline{A}_M \exp^{-\alpha x} + \underline{B}_M \exp^{-\alpha x}$$

Soit :

$$\varphi_M(x) = \underline{\mu}_M \cosh(-\alpha x) + \underline{\mu}'_M \sinh(-\alpha x)$$

✘ Mode symétrique (ou pair) :

☛ Région (D) :

$$\varphi_S^D(x) = \lambda \sin k \left( a + \frac{\ell}{2} - x \right)$$

☛ Région (G) :

$$\varphi_S(x) = \lambda \sin k \left( a + \frac{\ell}{2} + x \right)$$

☛ Région (M) :

$$\varphi_S^M(x) = \mu \cosh(\alpha x)$$

✘ Mode antisymétrique (ou impair) :

☛ Région (D) :

$$\varphi_A^D(x) = \lambda \sin k \left( a + \frac{\ell}{2} - x \right)$$

☛ Région (G) :

$$\varphi_A^G(x) = -\lambda \sin k \left( a + \frac{\ell}{2} + x \right)$$

☛ Région (M) :

$$\varphi_A^M(x) = \mu \sinh(\alpha x)$$

✘ Continuité en  $x = \pm\ell/2$  pour le mode symétrique :

Continuité de  $\varphi$  :

$$\varphi_S^D\left(\frac{\ell^+}{2}\right) = \varphi_S^M\left(\frac{\ell^-}{2}\right)$$

D'où :

$$\lambda \sin ka = \mu \cosh\left(\frac{\alpha\ell}{2}\right) \quad (15)$$

Continuité de  $\frac{d\varphi}{dx}$  :

$$\left. \frac{d\varphi_S^D}{dx} \right)_{\ell^+/2} = \left. \frac{d\varphi_S^M}{dx} \right)_{\ell^-/2}$$

D'où :

$$-\lambda k \cos ka = \mu \alpha \sinh\left(\frac{\alpha\ell}{2}\right) \quad (16)$$

En faisant les rapport des équations (17) et (18), on trouve bien :

$$\tan ka = -\frac{k}{\alpha} \coth\left(\frac{\alpha\ell}{2}\right)$$

✘ **Continuité en  $x = \pm\ell/2$  pour le mode antisymétrique :**

Continuité de  $\varphi$  :

$$\varphi_A^D\left(\frac{\ell^+}{2}\right) = \varphi_A^M\left(\frac{\ell^-}{2}\right)$$

D'où :

$$\lambda \sin ka = \mu \sinh\left(\frac{\alpha\ell}{2}\right) \quad (17)$$

Continuité de  $\frac{d\varphi}{dx}$  :

$$\left. \frac{d\varphi_A^D}{dx} \right)_{\ell^+/2} = \left. \frac{d\varphi_A^M}{dx} \right)_{\ell^-/2}$$

D'où :

$$-\lambda k \cos ka = \mu \alpha \cosh\left(\frac{\alpha\ell}{2}\right) \quad (18)$$

En faisant les rapport des équations (17) et (18), on trouve bien :

$$\tan ka = -\frac{k}{\alpha} \tanh\left(\frac{\alpha\ell}{2}\right)$$

✘ **Simplification dans le cas où  $\alpha\ell \gg 1$  :**

• Mode antisymétrique :

$$\tanh\left(\frac{\alpha\ell}{2}\right) = \frac{\exp\left(\frac{\alpha\ell}{2}\right) - \exp\left(-\frac{\alpha\ell}{2}\right)}{\exp\left(\frac{\alpha\ell}{2}\right) + \exp\left(-\frac{\alpha\ell}{2}\right)} = \frac{1 - \exp(-\alpha\ell)}{1 + \exp(-\alpha\ell)}$$

Soit, avec  $\alpha\ell \gg 1$  :

$$\tanh\left(\frac{\alpha\ell}{2}\right) \approx \left(1 - \exp(-\alpha\ell)\right)^2 \approx 1 - 2\exp(-\alpha\ell)$$

D'où la simplification du mode propre symétrique :

$$\tan ka = -\frac{k}{\alpha} \left(1 - 2\exp(-\alpha\ell)\right)$$

• Mode symétrique :

$$\coth\left(\frac{\alpha\ell}{2}\right) = \frac{\exp\left(\frac{\alpha\ell}{2}\right) + \exp\left(\frac{-\alpha\ell}{2}\right)}{\exp\left(\frac{\alpha\ell}{2}\right) - \exp\left(\frac{-\alpha\ell}{2}\right)} = \frac{1 + \exp(-\alpha\ell)}{1 - \exp(-\alpha\ell)}$$

Soit, avec  $\alpha\ell \gg 1$  :

$$\coth\left(\frac{\alpha\ell}{2}\right) \approx \left(1 + \exp(-\alpha\ell)\right)^2 \approx 1 + 2\exp(-\alpha\ell)$$

D'où la simplification du mode propre symétrique :

$$\tan ka = -\frac{k}{\alpha} \left(1 + 2\exp(-\alpha\ell)\right)$$