

Chapitre III

$\hbar$

***Particule dans un
potentiel
stationnaire***

$\hbar$

Un potentiel stationnaire = constante

*L'opérateur énergie potentielle : V

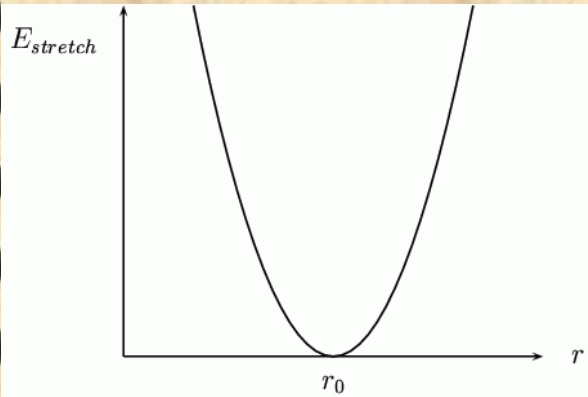
L'énergie potentielle est liée aux forces agissant sur le système par la relation:

$$\vec{F} = -\overrightarrow{\text{grad}} V = - \frac{\partial V}{\partial x} \vec{i} - \frac{\partial V}{\partial y} \vec{j} - \frac{\partial V}{\partial z} \vec{k}$$

V est généralement une fonction des coordonnées géométriques du système et ne comporte pas d'opérateurs différentiels. C'est un opérateur **multiplicatif**.

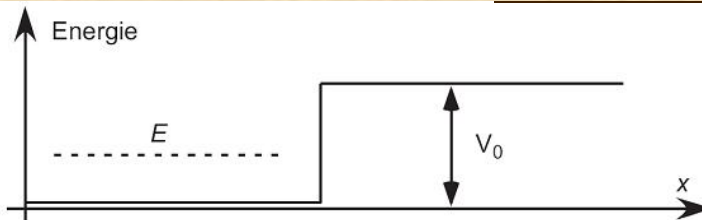
Une particule quantique libre est une particule quantique évoluant dans le vide sans interaction, **$V = 0$**

Exemples d'opérateurs énergie potentielle 1D :

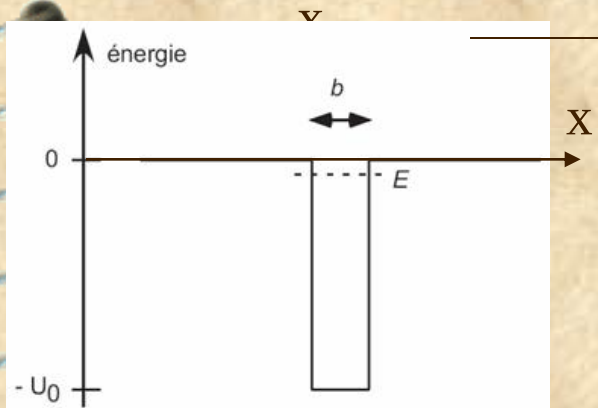
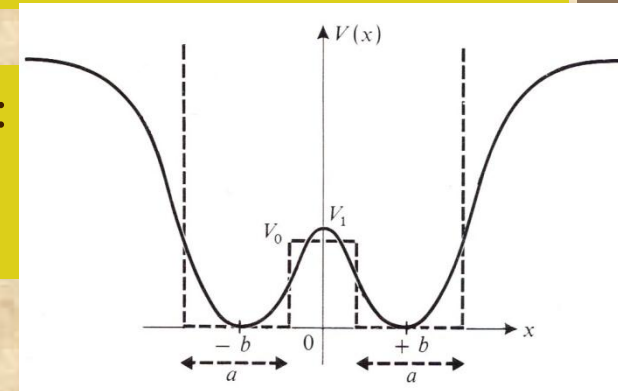


$$\text{Potentiel harmonique : } V = \frac{1}{2} k (r - r_0)^2$$

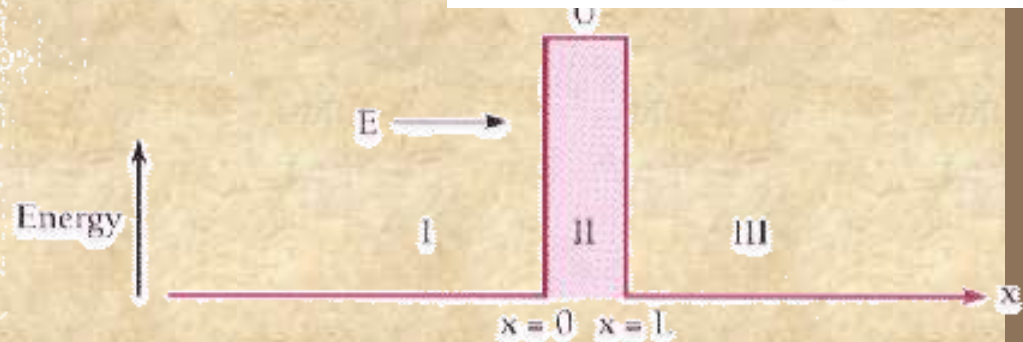
Potentiel du ressort, très important dans de nombreux modèles physiques (liaison chimique).



Marche de potentiel :
 $V = V_0$ si $x > x_0$
 $V = 0$ sinon



Puit de potentiel



Barrière de potentiel

Résolution Stationnaire de l'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger = Équation de mouvement

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

$i^2 = -1$

*Fonctions
d'onde complexes*

Évolution

**Hamiltonien : dépend
du champ de forces**

$$\hat{H} = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots + V(\vec{r}, t)$$

Séparation des variables

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})\chi(t)$$

$$i\hbar\varphi\frac{\partial\chi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\chi\Delta\varphi + V\varphi\chi$$

$$i\hbar\frac{1}{\chi}\frac{d\chi}{dt} = \frac{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right]\varphi}{\varphi}$$

$$i\hbar\frac{d\chi}{d\chi} = E dt$$



$$\chi(t) = \chi(0)e^{-i(E/\hbar)t}$$

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

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})e^{-i(E/\hbar)t}$$

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

On dit dans ce cas que la particule est dans des **états stationnaires** c'est à dire pour lesquels l'énergie **E** est constante.

Ces états est obtenu en résolvant l'équation

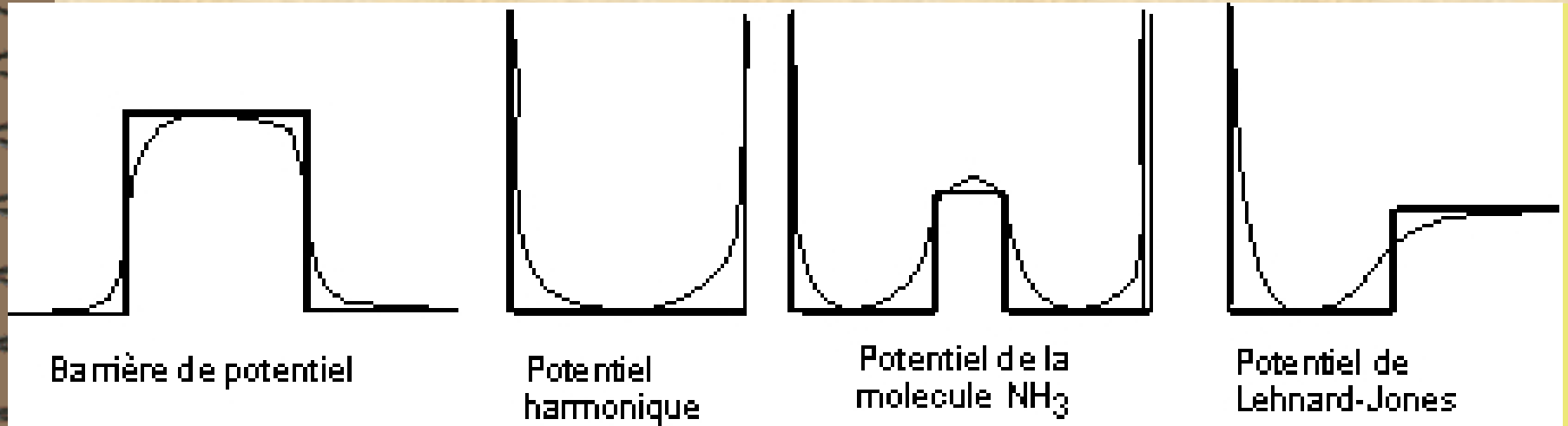
$$\mathbf{H}\phi = \mathbf{E}\phi$$

Fonction propre de E

Valeurs propres de H

$$\int |\phi(\vec{r})|^2 d^3r = 1$$

Modélisation de potentiels réels



Pour simplifier

Équation de Schrödinger unidimensionnelle

Cas des potentiels pairs $V(x) = V(-x)$

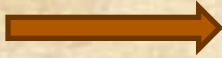
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E \varphi(x)$$

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

$\varphi(x)$ et $\varphi(-x)$ sont solutions de la même équation différentielle linéaire


$$\varphi(x) = \varepsilon \cdot \varphi(-x)$$


$$\varphi(-x) = \varepsilon \varphi(x)$$


$$\varphi(x) = \varepsilon^2 \varphi(x)$$

Ce qui implique que : $\varepsilon = \pm 1$

ε est appelée parité de la fonction :

- Pour $\varepsilon = 1$, la fonction d'onde est une fonction paire, elle est dite symétrique.
- Pour $\varepsilon = -1$, la fonction d'onde est une fonction impaire, elle est dite antisymétrique.

Conditions aux limites

L'équation de Schrödinger est une équation différentielle à dérivé partiel de seconde ordre, pour la résoudre on applique les conditions aux limites:

- Continuité de la fonction d'onde $\Psi(\mathbf{x})$.
- Continuité de la dérivée première de la fonction d'onde $d\Psi(\mathbf{x})/d\mathbf{x}$.

Etats liés et états continus

Lorsque la particule reste confinée dans une région de l'espace, la probabilité de la trouver à l'infini est nulle à tout moment. Sa fonction d'onde est donc normalisable et les valeurs de son énergie sont quantifiées : Le spectre en énergie de la particule est dans ce cas discontinu et on dit que la particule se trouve dans des **états liés**.

Si la particule n'est pas confinée dans une région donnée, elle peut explorer tout l'espace et se trouver même à l'infini. La fonction d'onde n'est plus normalisable et le spectre en énergie est continu. On dit alors que la particule se trouve dans des **états non liés ou continus**.

$$\left(\frac{1}{C^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta\right) \vec{E} = 0$$

$$\left(\frac{n^2}{C^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta\right) \vec{E} = 0$$

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{\xi}(\vec{r}) e^{-i\omega t}$$

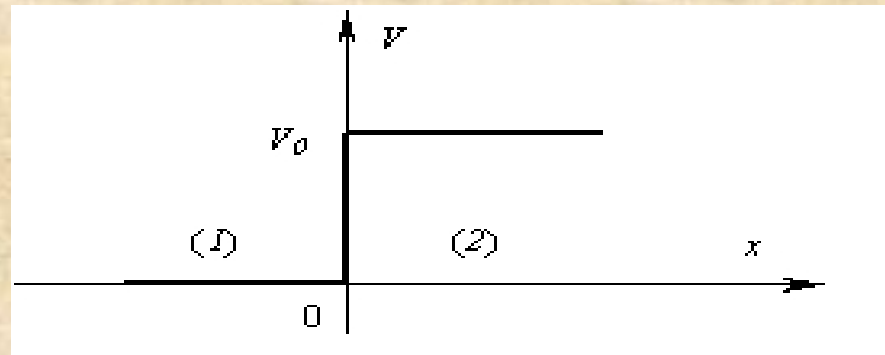
$$\left(\Delta + \frac{n^2 \omega^2}{C^2}\right) \vec{\xi}(\vec{r}) = \vec{0} \quad \longleftrightarrow \quad \left[\Delta + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)\right] \varphi(\vec{r}) = 0$$

La même forme

On peut associer au problème de mécanique quantique un problème d'optique et réciproquement. La relation décrivant cette analogie est :

$$\frac{n\omega}{C} \leftrightarrow \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V)}$$

Marche de potentiel



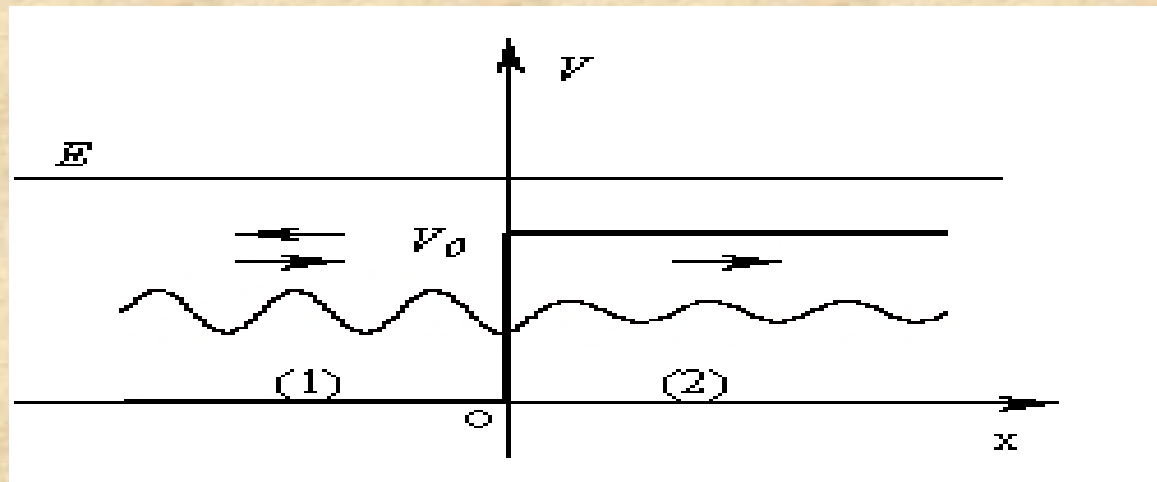
$$V(x) = 0 \text{ pour } x < 0$$

$$V(x) = V_0 \text{ pour } x > 0$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \varphi = 0$$

Nous devons considérer deux cas, suivant que E est supérieur ou inférieure à la hauteur de la marche V_0 .

Cas où $E > V_0$



Etude classique

La particule d'énergie E à une vitesse $\sqrt{2E/m}$ dans la **région (1)**
elle est ralentie à la discontinuité

Elle prend la vitesse $\sqrt{2(E - V_0)/m}$ dans la **région (2)**.

Etude quantique

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \varphi = 0$$

Région (1)

$$\varphi_1'' + k_1^2 \varphi_1 = 0$$

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \quad k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

Région (2)

$$\varphi_2'' + k_2^2 \varphi_2 = 0 \quad \varphi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x} \quad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$$

$A_1 e^{ik_1 x}$ représente l'onde incidente et $A_1' e^{-ik_1 x}$ l'onde réfléchie par le saut de potentiel.

$A_2 e^{ik_2 x}$ représente l'onde transmise et $A_2' e^{-ik_2 x}$ est une onde réfléchie qui reviendrait de l'infini, ce qui est impossible, donc
 $A_2' = 0$.

Les solutions dans les deux régions sont en définitive :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}$$

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x}$$

Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0)$$

$$\varphi_1'(0) = \varphi_2'(0)$$

$$\frac{A_1'}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$$

$$T = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2$$

On définit alors les coefficients de réflexion R et de transmission T de la particule par :

$$R = \left| \frac{A_1'}{A_1} \right|^2$$

$$T = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2$$

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 = 1 - \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

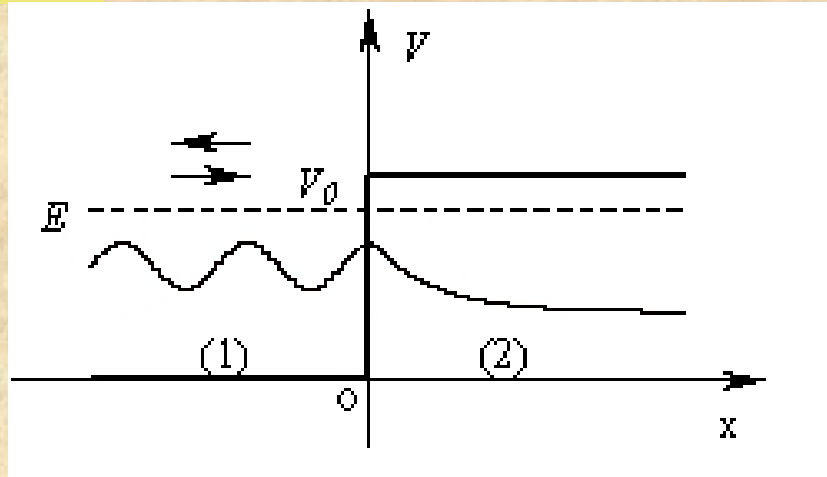
$$T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

$$\mathbf{R + T = 1}$$

Analogie optique

On a deux milieux d'indices $\mathbf{n_1}$ et $\mathbf{n_2}$ réels (réflexion vitreuse). L'onde incidente donne naissance à une onde réfléchie et à une onde transmise.

Cas où $0 \leq E \leq V_0$



La particule a une vitesse $\sqrt{2E/m}$ dans la **région (1)**,
elle rebondit élastiquement à la discontinuité et repart avec
une vitesse identique.

Etude quantique

Région (1) $\varphi_1'' + k_1^2 \varphi_1 = 0$

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \quad k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

Région (2) $\varphi_2'' + \rho_2^2 \varphi_2 = 0 \quad \varphi_2(x) = B_2 e^{\rho_2 x} + B_2' e^{-\rho_2 x} \quad \rho_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$

Pour que $\varphi_2(x)$ reste bornée lorsque x tend vers l'infini il faut que $B_2 = 0$, ce qui conduit à :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}$$

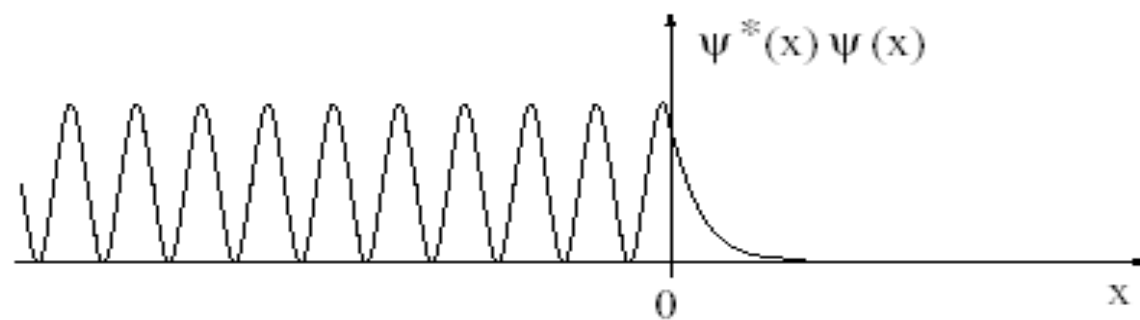
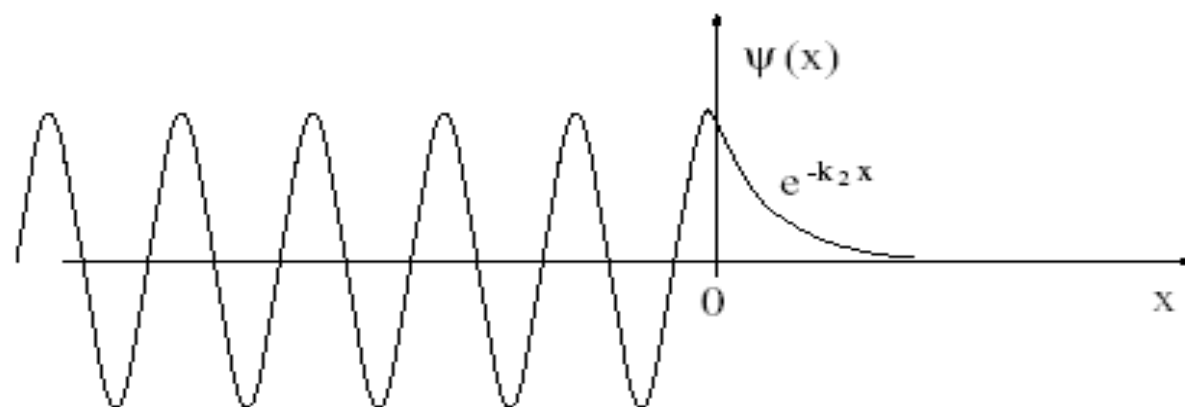
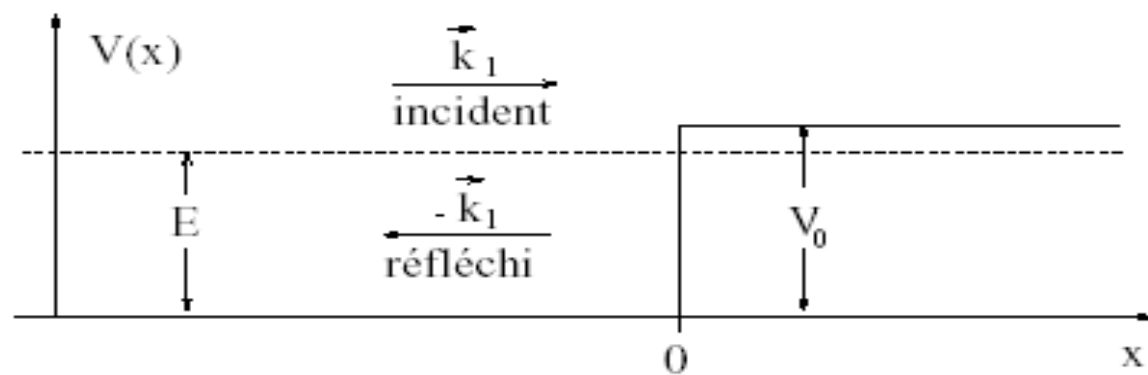
$$\varphi_2(x) = B_2' e^{-\rho_2 x}$$

$$\frac{A_1'}{A_1} = \frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2}$$

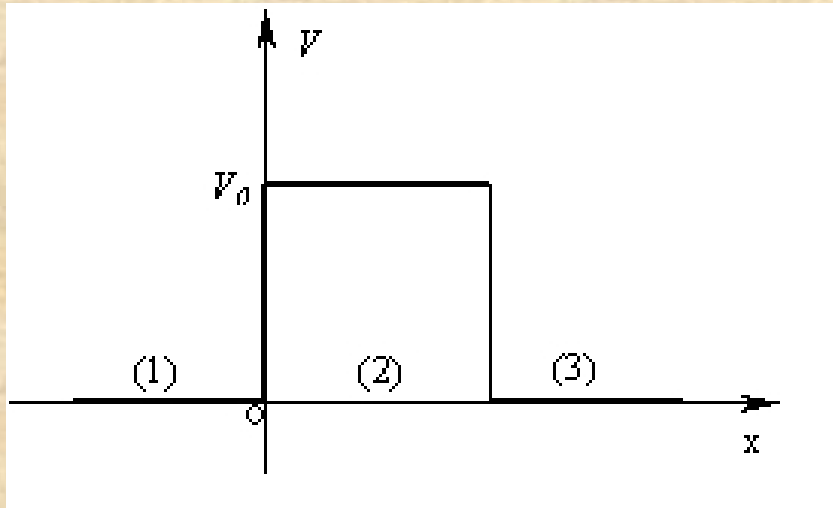
$$\frac{B_2'}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + i\rho_2}$$

$$R = \left| \frac{A_1'}{A_1} \right|^2 = 1$$

On doit donc avoir $\mathbf{T} = \mathbf{0}$, cependant $\left| \frac{B_2'}{A_1} \right|^2$ est différent de zéro, ce qui implique que la vitesse de groupe du paquet d'ondes est nulle dans la **région (2)**.



Barrière de potentiel



$$V(x) = 0 \text{ pour } x < 0$$

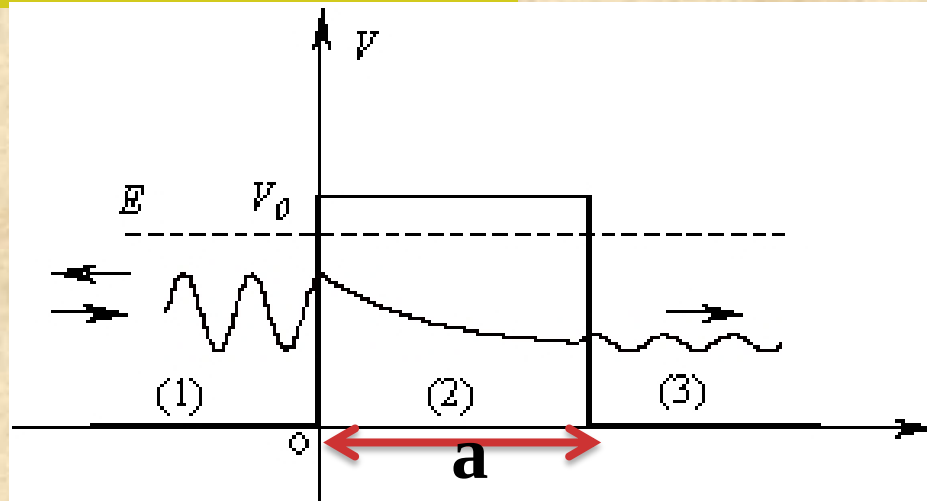
$$V(x) = V_0 \text{ pour } 0 \leq x \leq a$$

$$V(x) = 0 \text{ pour } x > a$$

Figure 3.5 : Barrière carrée de potentiel

a est appelé épaisseur de la barrière et **V_0** son hauteur.

Cas où $E < V_0$: Effet Tunnel



Barrière carrée de potentiel ($E < V_0$)

Traversée de la barrière

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}$$

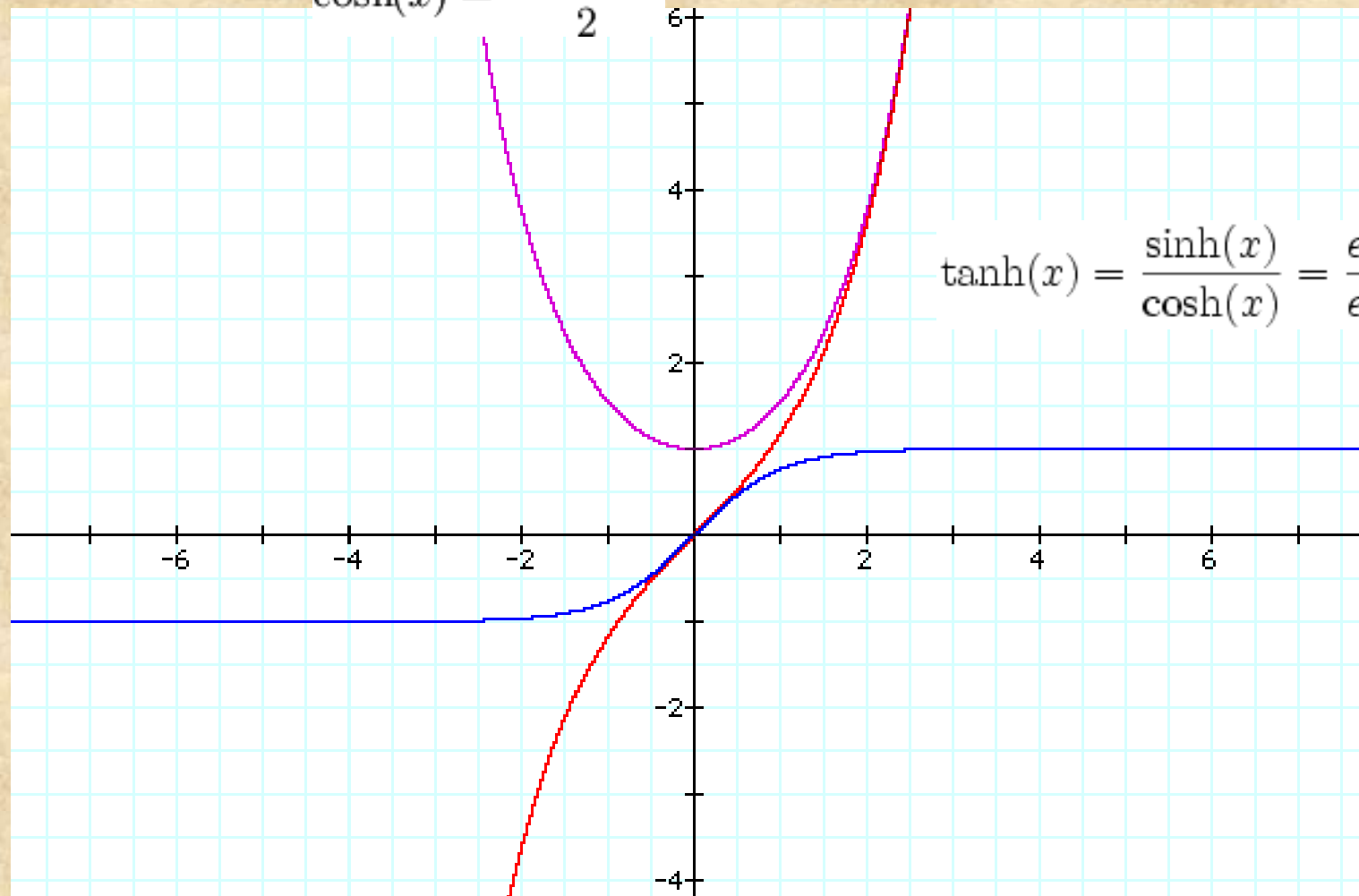
$$\varphi_2(x) = A_2 e^{\rho_2 x} + A_2' e^{-\rho_2 x}$$

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A_3' e^{-ik_1 x}$$

k_1 et ρ_2 ont leur signification précédente et A_3' doit être nul car toute réflexion à l'infini est impossible.

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \varphi = 0$$

$$\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$$



$$\tanh(x) = \frac{\sinh(x)}{\cosh(x)} = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$

$$\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

Rappel : Les fonction hyperboliques

Les conditions de continuité en $x = 0$ et $x = a$ donnent, après un calcul laborieux mais non difficile à mener, les expressions suivantes des coefficients de réflexion et de transmission **R** et **T** :

$$R = \left| \frac{A_1'}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1^2 + \rho_2^2) \text{sh}^2(\rho_2 a)}{4k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 + \rho_2^2)^2 \text{sh}^2(\rho_2 a)}$$

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4k_1^2 \rho_2^2}{4k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 + \rho_2^2)^2 \text{sh}^2(\rho_2 a)}$$



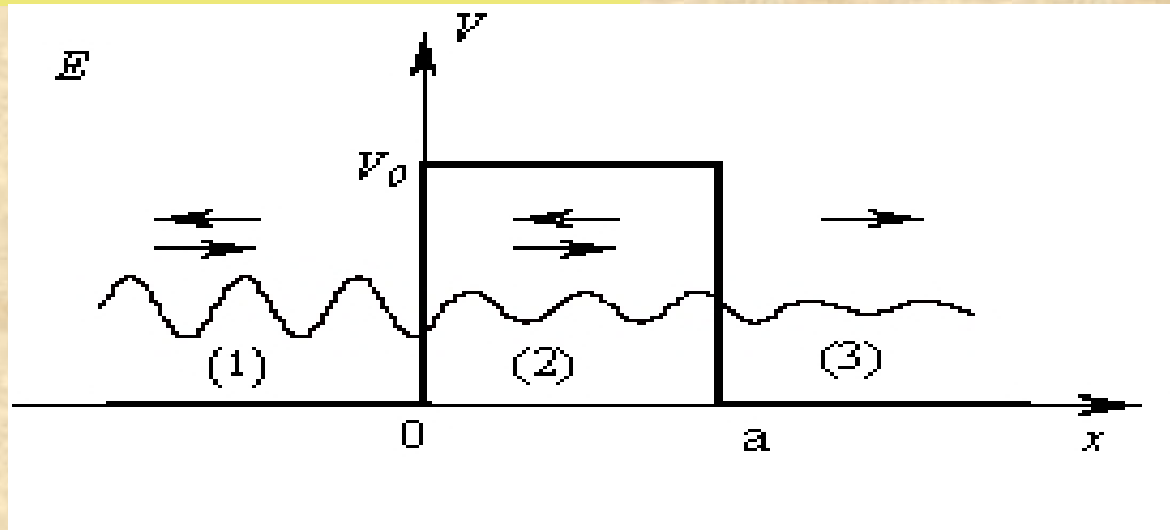
contrairement aux prévisions classiques, la particule a une probabilité non nulle de franchir la barrière de potentiel : c'est l'effet Tunnel

- L'effet tunnel : c'est donc le fait d'avoir des électrons qui passent une barrière de potentiel alors qu'ils n'ont pas selon la physique classique l'énergie nécessaire.

Principe de l'effet tunnel

- Plus l'énergie cinétique augmente plus les électrons peuvent passer.
- Si $E_c = E_p \Rightarrow$ Tous les électrons ne passent pas, ils repartent donc dans l'autre sens
- Si $E_c > E_p \Rightarrow$ Plus d'électrons passent mais toujours pas tous.

Cas où $E > V_0$: Transfert résonnant



Marche de potentiel ($E > V_0$)

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}$$

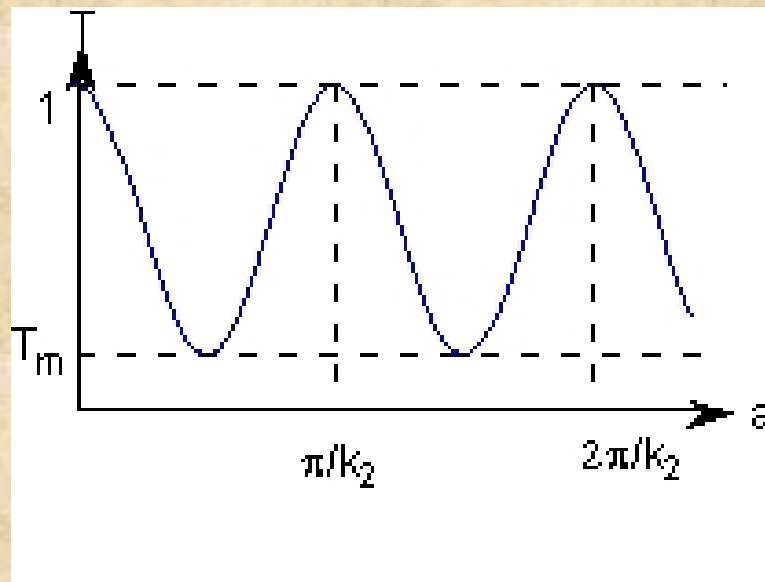
$$\varphi_2(x) = B_2 e^{ik_2 x} + B_2' e^{-ik_2 x}$$

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A_3' e^{-ik_1 x}$$

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar} (E - V_0)$$

$$R = \left| \frac{A_1'}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2) \sin^2(\rho_2 a)}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)}$$

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)}$$



Variation du coefficient de transmission avec a

On aura alors un transfert maximal ou résonnant chaque fois que $a = n\pi/k_2$.

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)}$$

On remarque qu'il n'y a transmission complète ($T = 1$) que lorsque $\mathbf{k_2 a}$ est un multiple de π .

Au fur et à mesure que la largeur de la barrière croît, le coefficient de transmission oscille entre cette valeur maximum et une valeur minimale T_m pour laquelle $\mathbf{k_2 a} = (2n + 1)\pi/2$ et qu'on montre égale à :

$$T_m = \frac{4E(E - V_0)}{(2E - V_0)^2}$$

Puits de potentiel

Puits de potentiel fini

a – traitement classique

Problème : une particule de masse m sur Ox . Conditions initiales :

$$x = x_0 \quad \text{et} \quad \dot{x} = \dot{x}_0$$

$$E = \text{cste} = \frac{1}{2} m \dot{x}_0^2$$

Si $E < V_0$ La particule effectue des aller retour dans le puits

Si $E > V_0$ La particule part à l'infini $E = \frac{1}{2} m v^2 + V_0$

b – traitement quantique

Conditions aux limites ($x \rightarrow +\infty$ et $x \rightarrow -\infty$)

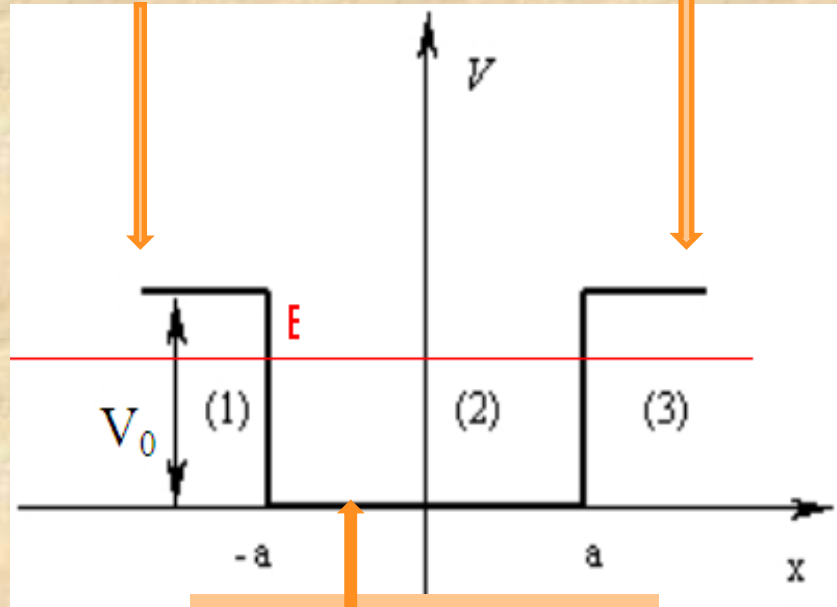
$$E < V_0$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \varphi = 0$$

$$\varphi_1(x) = B_1 e^{\rho x}$$

$$\rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$$

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = B_1 e^{\rho x} \\ \varphi_2^I(x) = B \sin kx \\ \varphi_3(x) = B_2' e^{-\rho x} \end{cases}$$



$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi = 0$$

$$\varphi_3(x) = B_2' e^{-\rho x}$$

$$\rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$$

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = B_1 e^{\rho x} \\ \varphi_2^P(x) = A \cos kx \\ \varphi_3(x) = B_2' e^{-\rho x} \end{cases}$$

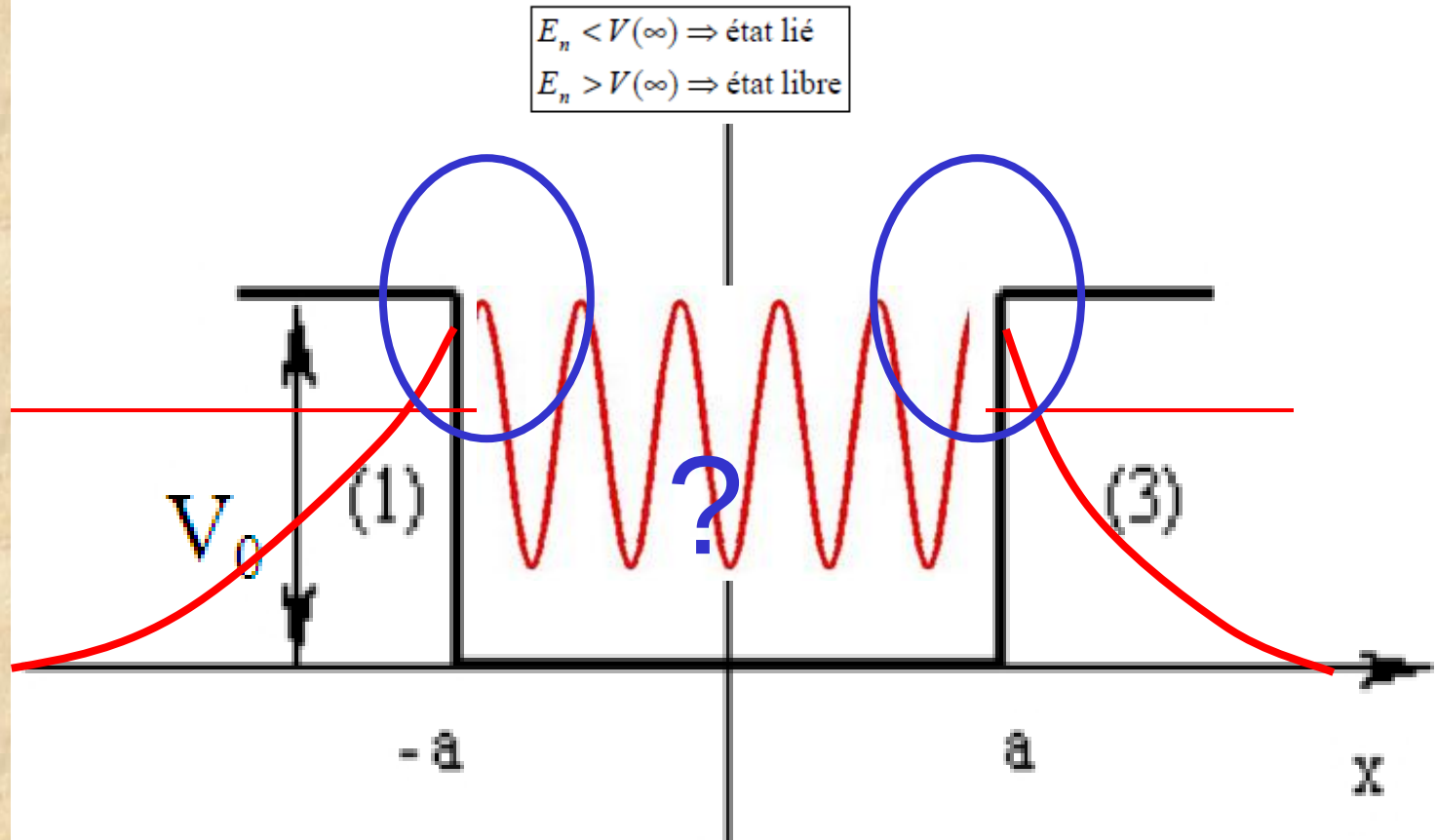
Avec $B_2' = B_1$

$$\varphi_2(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}$$

avec $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$

On obtient une solution oscillante pour $\varphi_n^{I,III}$, d'où une probabilité de présence non nulle des particules à l'infini : la particule est dans un état libre.

Généralisation des états libres / liés



$$\varphi_1(x) = B_1 e^{\rho x}$$

$$\varphi_2(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}$$

$$\varphi_3(x) = B_2' e^{-\rho x}$$

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

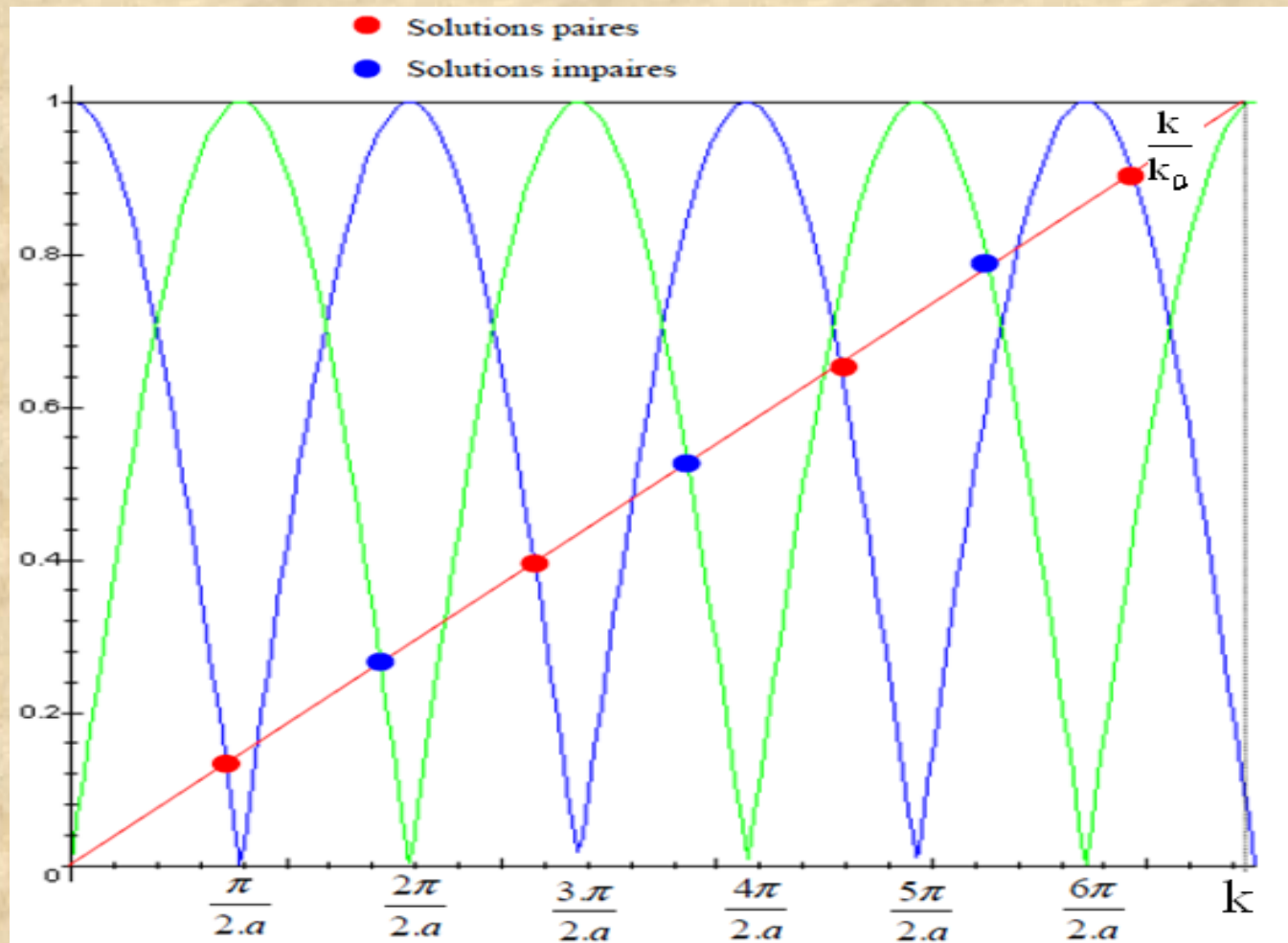
$$\rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$$

Conditions de continuité

($x = -a$ et $x = a$)

Les conditions de raccordement imposées à la fonction d'onde et à sa dérivée aux points $x = -a$ et $x = +a$ conduisent pour les deux ensembles de solutions aux deux conditions de quantification suivantes :

$$\tan g(ka) = \frac{\rho}{k} \quad \cot g(ka) = -\frac{\rho}{k}$$

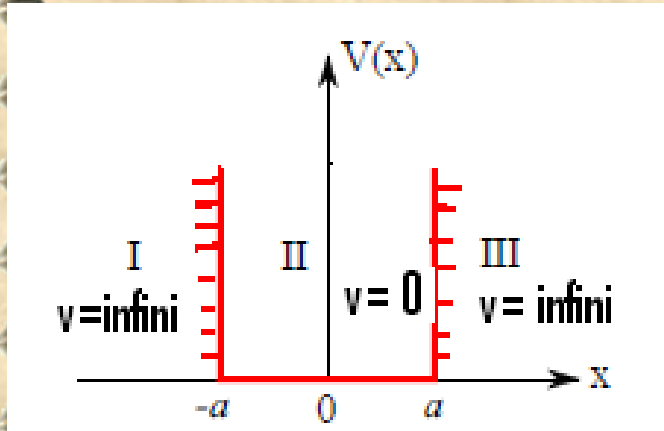


Classiquement: si $E > U_0$, la traversée de la barrière est possible. Par contre pour $E < U_0$, il est impossible.

Qu'en est il en mécanique quantique?

Puits de Potentiel infini

Niveaux d'énergie et fonctions d'onde



$$V=0 \text{ si } -a < x < a$$

$$V=\text{infini} \text{ sinon}$$

L'énergie potentielle V_0 caractérisant la profondeur du puits devient infiniment grande devant l'énergie E de la particule

Classiquement la particule ne peut qu'osciller entre les deux parois du puits.

Quantiquement la fonction d'onde de la particule doit être nulle à l'extérieur du puits ($\phi_1 = \phi_3 = 0$) et continue en $x = \pm a$.

A l'intérieur du puits, et en raison de la parité du potentiel les solutions de l'équation de Schrödinger sont soit paires soit impaires.

Les fonctions d'onde de la particule sont donc :

$$\varphi_2^P(x) = A \cos kx \quad \text{et} \quad \varphi_2^I(x) = B \sin kx$$

Les conditions de continuité en $x = -a$ et en $x = a$ donnent :

- **Pour les fonctions paires**

$$\cos ka = 0 \quad \longrightarrow \quad ka = (2n + 1) \frac{\pi}{2} \quad \longrightarrow \quad E_p = (2n + 1)^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$$

- **Pour les fonctions impaires**

$$\sin ka = 0 \quad \longrightarrow \quad ka = n\pi \quad \longrightarrow \quad E_p = (2n)^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$$

Les deux expressions de l'énergie E_p et E_I peuvent être regroupées en une seule relation :

$$E_p = N^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad \text{avec} \quad N = 1, 2, 3, \dots$$

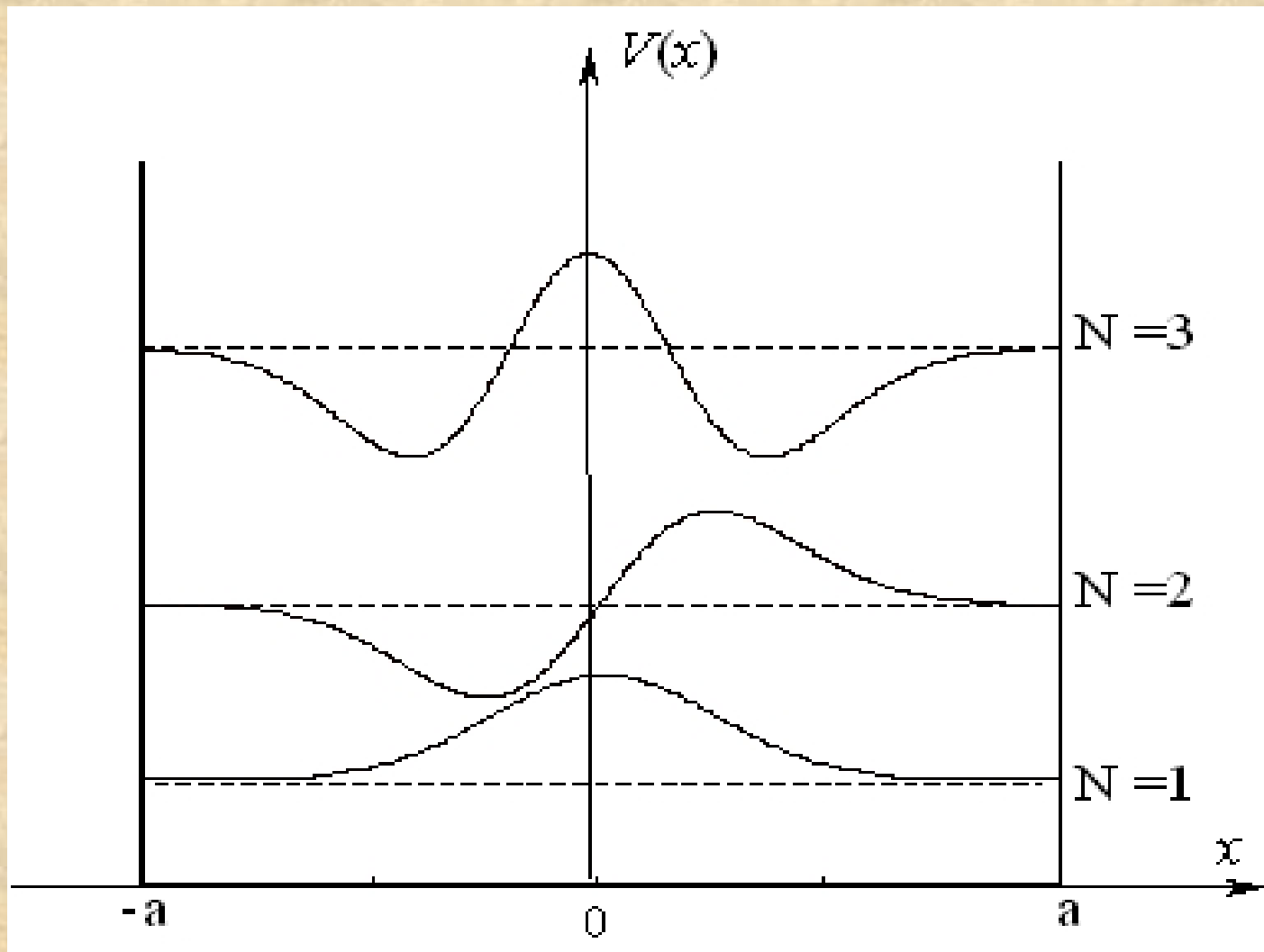
Les constantes **A** et **B** se calculent facilement en normalisant les fonctions d'onde c'est à dire en écrivant :

$$\int_{-a}^{+a} |\varphi(x)|^2 dx = 1$$

$$A = B = \frac{1}{\sqrt{a}}$$

$$\varphi_2^p(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left[\frac{(2n+1)}{2a} \pi x\right] \quad : \text{fonctions paires ou symétriques}$$

$$\varphi_2^I(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n}{a} \pi x\right) \quad : \text{fonctions impaires ou antisymétriques}$$



Fonctions d'onde et niveaux d'énergie d'une particule dans un puits de potentiel

Remarques

Etat fondamental

Alors que l'état fondamental de la particule classique est caractérisé par une énergie nulle, l'état fondamental ($N = 1$) de la particule quantique est tel que :

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \neq 0$$

Ce résultat est une conséquence du principe d'incertitude de Heisenberg, en effet :

$$\Delta x \approx 2a \quad \text{et} \quad \Delta p \approx p - (-p) = 2p$$

$$\Delta x \Delta p \approx 4ap \geq h \quad \text{et} \quad p \geq h/4a$$

La particule étant libre à l'intérieur du puits on a :

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \text{soit} \quad E \geq \frac{1}{2m} \left(\frac{h}{4a} \right)^2 \quad E_1 \geq \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

On aura alors toujours $E \geq E_1$.

Analogie avec les cordes vibrantes

A l'intérieur du puits la particule est dans des états stationnaires. On peut donc faire une analogie avec la corde vibrante en prenant pour longueur d'onde associée à la particule la longueur d'onde de De Broglie. On sait que lorsque la corde de longueur L est le siège d'ondes stationnaires de longueur d'onde λ , on a :

$$L = N \frac{\lambda}{2}$$

Dans le cas du puits de potentiel on a :

$$L = 2a \quad \text{et} \quad \lambda = \lambda_{\text{DB}} = \frac{h}{p}$$

On aura donc :

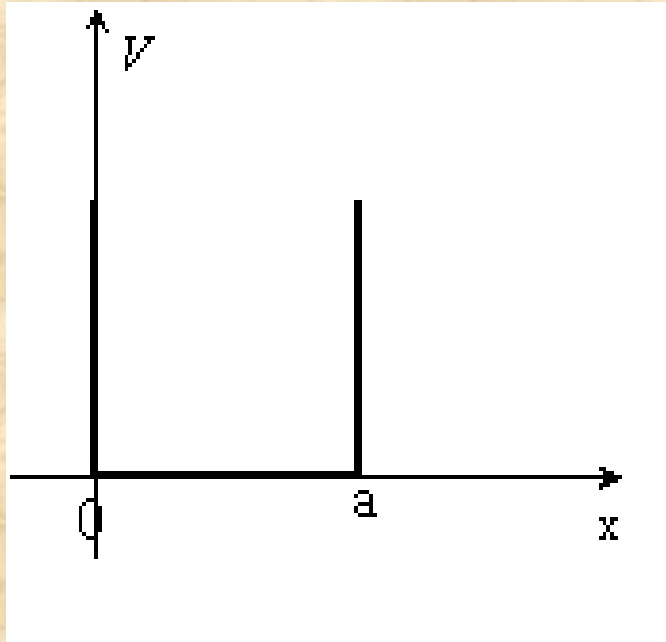
$$2a = \frac{N h}{2p} \quad \text{soit} \quad p = \frac{N h}{4a}$$

$$\text{et l'énergie } E \text{ est telle que : } E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} N^2 \left(\frac{h}{4a} \right)^2 = \frac{1}{2m} N^2 \left(\frac{2\pi\hbar}{4a} \right)^2$$

$$\text{Soit } E = N^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$$

qui est un résultat identique à celui trouvé à partir des conditions de quantification

Puits de potentiel quelconque



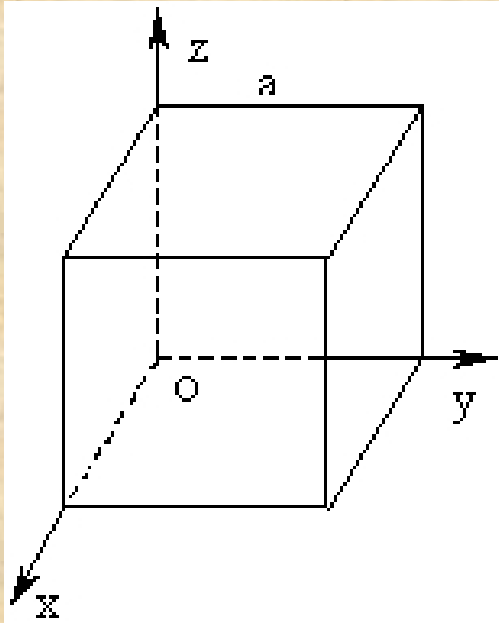
Potentiel n'est pas pair

Même démarche

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

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

Boite de Potentiel



$$V(x,y,z)=\begin{cases} 0 & \text{pour } 0 < x < a, 0 < y < a, 0 < z < a \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x,y,z) \right] \psi(x,y,z) = E \psi(x,y,z)$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x,y,z) = E \psi(x,y,z)$$

Cette équation se résout en séparant les variables :

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x) \times \psi_2(y) \times \psi_3(z)$$

ce qui conduit à trois équations du type :

$$\frac{1}{\psi_i(x_i)} \frac{\partial^2 \psi_i(x_i)}{\partial x_i^2} = -k_i^2 \quad \text{où } i = 1, 2, 3 \text{ et } x_1 = x, x_2 = y \text{ et } x_3 = z.$$

Les solutions de ces équations sont :

$$\psi_i(x_i) = A \sin(k_i x_i + \delta_{x_i})$$

Les conditions de continuité en $x = 0$, $y = 0$ et $z = 0$ et en $x = a$, $y = a$ et $z = 0$ donnent :

$$\delta_x = \delta_y = \delta_z = 0$$

$$ak_x = n_x \pi,$$

$$ak_y = n_y \pi,$$

$$a_k z = n_z \pi$$

ce qui conduit en définitive aux énergies propres et fonctions propres suivantes de la particule :

$$E_{n_x, n_y, n_z} = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = A \sin(n_x \frac{\pi}{a} x) \sin(n_y \frac{\pi}{a} y) \sin(n_z \frac{\pi}{a} z)$$

La constante A s'obtient en normalisant la fonction d'onde :

$$\begin{aligned} \int \psi_{n_x, n_y, n_z}^*(x, y, z) \psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) dV &= \\ &= |A|^2 \int_0^a \sin^2(n_x \frac{\pi}{a} x) dx \int_0^a \sin^2(n_y \frac{\pi}{a} y) dy \int_0^a \sin^2(n_z \frac{\pi}{a} z) dz \end{aligned}$$

on aura après un calcul d'intégration simple :

$$|A| = \sqrt{\frac{8}{a^3}}$$

En posant $n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$

$$E_n = N^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

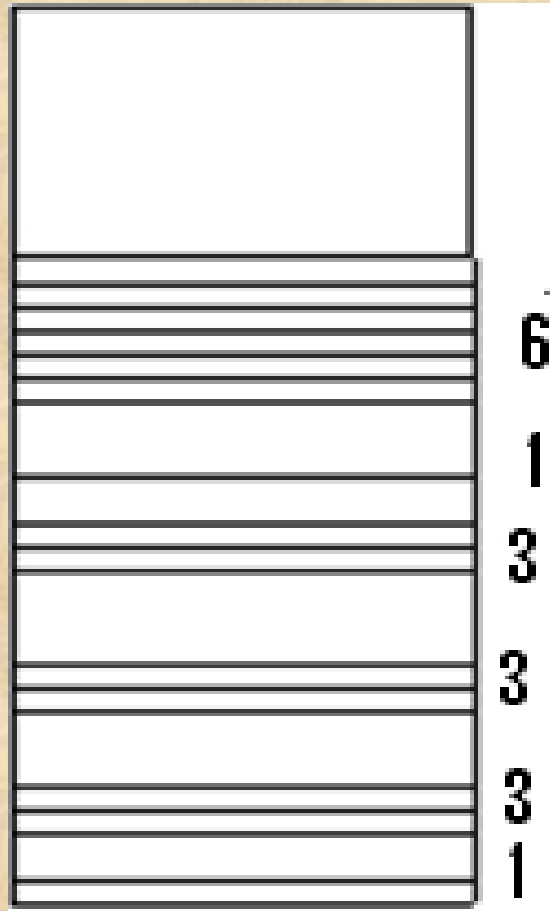
$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin(n_x \frac{\pi}{a} x) \sin(n_y \frac{\pi}{a} y) \sin(n_z \frac{\pi}{a} z)$$

Dans ce cas, une même énergie peut correspondre à plusieurs fonctions propres car plusieurs jeux des nombres entiers n_x , n_y , n_z peuvent donner une même valeur de N^2 . On dit alors que l'énergie est dégénérée; son degré de dégénérescence g est le nombre de fonctions propres linéairement indépendantes correspondant à cette même valeur de l'énergie. Il est facile de déterminer le degré de dégénérescence g comme le montre le tableau suivant :

Où on a posé

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

Energie	Combinaisons (n_x, n_y, n_z)	Degré de dégénérescence
3 E_1	(1, 1, 1)	1
6 E_1	(2, 1, 1) , (1, 2, 1) , (1, 1, 2)	3
9 E_1	(2, 2, 1) , (2, 1, 2) , (1, 2, 2)	3
11 E_1	(3, 1, 1) , (1, 3, 1) , (1, 1, 3)	3
12 E_1	(2, 2, 2)	1
14 E_1	(1, 3, 2) , (2, 1, 3) , (3, 1, 2) (1, 2, 3) , (3, 2, 1) , (2, 3, 1)	6



Levée de dégénérescence des niveaux d'énergie dans une boîte rectangulaire

Lorsque la boîte est rectangulaire d'arêtes **a**, **b**, **c** on montre facilement que les énergies propres et fonctions propres sont données par :

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)$$

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(n_x \frac{\pi}{a} x\right) \sin\left(n_y \frac{\pi}{b} y\right) \sin\left(n_z \frac{\pi}{c} z\right)$$

Les états **stationnaires** de fonctions d'onde linéairement **indépendantes** entre elles d'une équation de Schrödinger pour une **énergie** potentielle **indépendante** du **temps** constituent une **base** des fonctions d'onde $\Psi(M,t)$ solutions de cette dernière équation.

Équation de Schrödinger unidimensionnelle

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

Définition

Une particule quantique **libre** est une particule quantique évoluant dans le vide **sans interaction**, $V = 0$

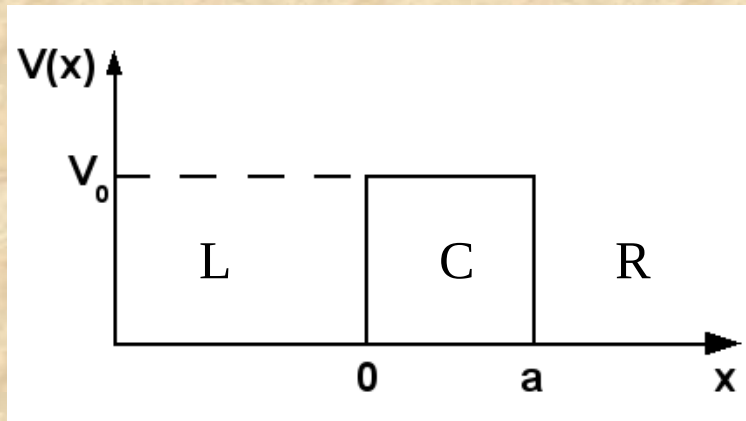
Propriété

On représente une **particule quantique non localisée** par un **paquet d'ondes quasi monochromatique** de vecteur d'onde moyen $\mathbf{k}$ et de pulsation moyenne ω

La quantité de mouvement $\mathbf{p}$ et l'énergie E de la particule quantique sont données par les relations :

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v}_g = \hbar\mathbf{k} \quad E = \hbar\omega$$

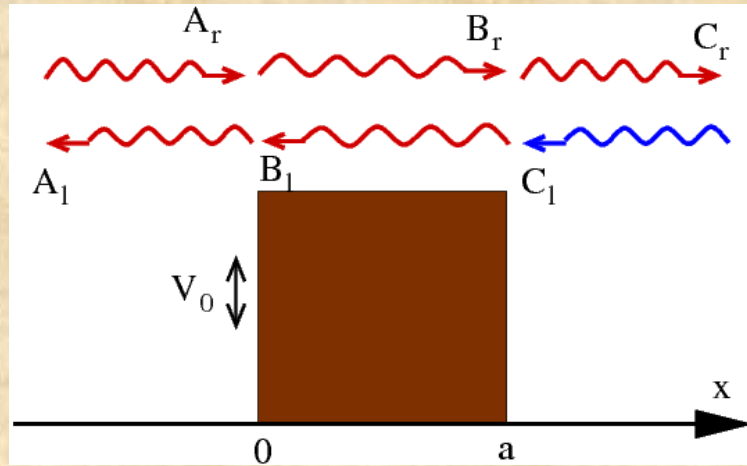
2) Etude de la barrière de potentiel



$V(x)=0$ si $x>a$ ou $x<0$
 $V(x)=V_0$ si x entre 0 et a

L'équation de Schrödinger est :

$$H\psi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x),$$



Dans chaque région, les solutions sont de la forme :

$$\psi_L(x) = A_r e^{ik_0 x} + A_l e^{-ik_0 x} \quad x < 0$$

$$k_0 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$$

$$\psi_C(x) = B_r e^{ik_1 x} + B_l e^{-ik_1 x} \quad 0 < x < a$$

$$k_1 = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$$

$$\psi_R(x) = C_r e^{ik_0 x} + C_l e^{-ik_0 x} \quad x > a$$

$$k_0 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$$

NB : Si l'énergie de la particule est inférieure à V_0 , k_1 est imaginaire
Et ψ_C est formé d'exponentielles décroissantes.

Conditions aux limites

$$\psi_L(0) = \psi_C(0)$$

$$\frac{d}{dx}\psi_L(0) = \frac{d}{dx}\psi_C(0)$$

$$\psi_C(a) = \psi_R(a)$$

$$\frac{d}{dx}\psi_C(a) = \frac{d}{dx}\psi_R(a)$$

$$\begin{aligned} A_r + A_l &= B_r + B_l \\ k_0(A_r - A_l) &= k_1(B_r - B_l) \end{aligned}$$



$$B_r e^{iak_1} + B_l e^{-iak_1} = C_r e^{iak_0} + C_l e^{-iak_0}$$

$$k_1(B_r e^{iak_1} - B_l e^{-iak_1}) = k_0(C_r e^{iak_0} - C_l e^{-iak_0})$$

Les solutions (statiques)

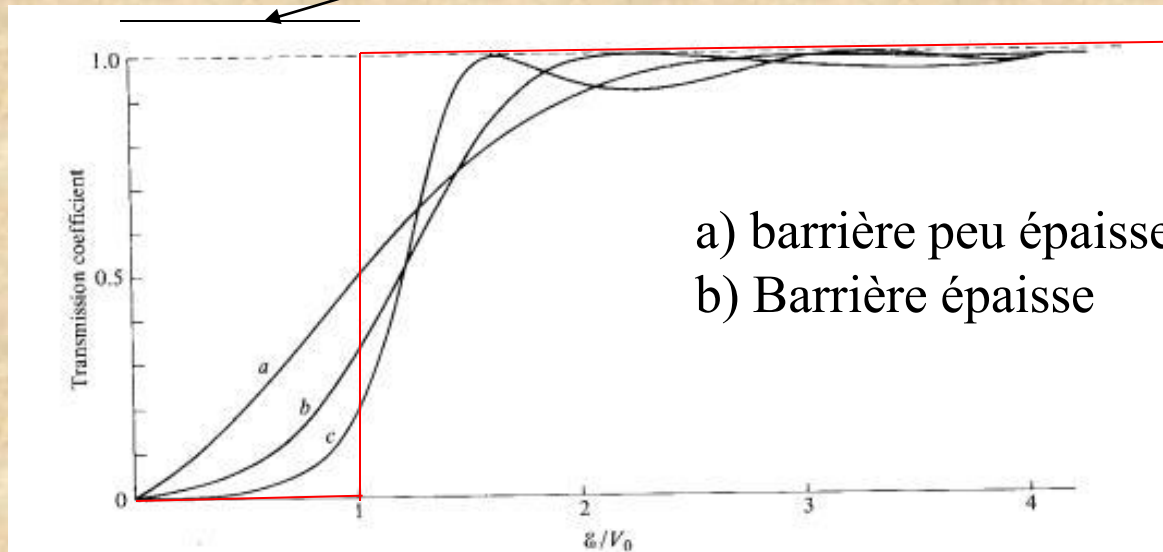
Solution dynamique

En supposant que la particule arrive par la gauche. Et que donc $C_l=0$

Coefficient de transmission

$$\frac{C_r}{A_r} = t = \frac{4k_0k_1e^{-ia(k_0-k_1)}}{(k_0+k_1)^2 - e^{2iak_1}(k_0-k_1)^2}$$

Transmission totale si $C_r = A_r$. La probabilité de transmission, $|t|^2$ est non nulle, même lorsque la particule a une énergie inférieure à V_0 . C'est l'**effet tunnel**.

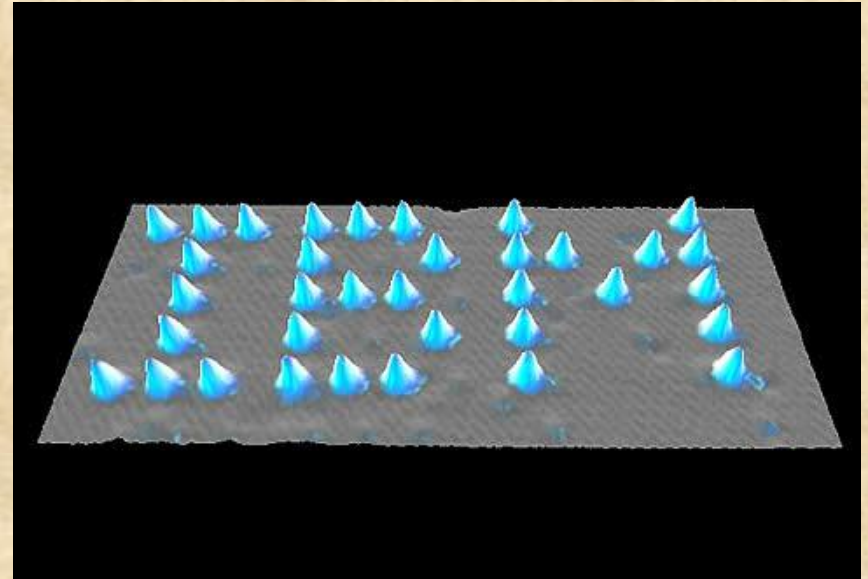
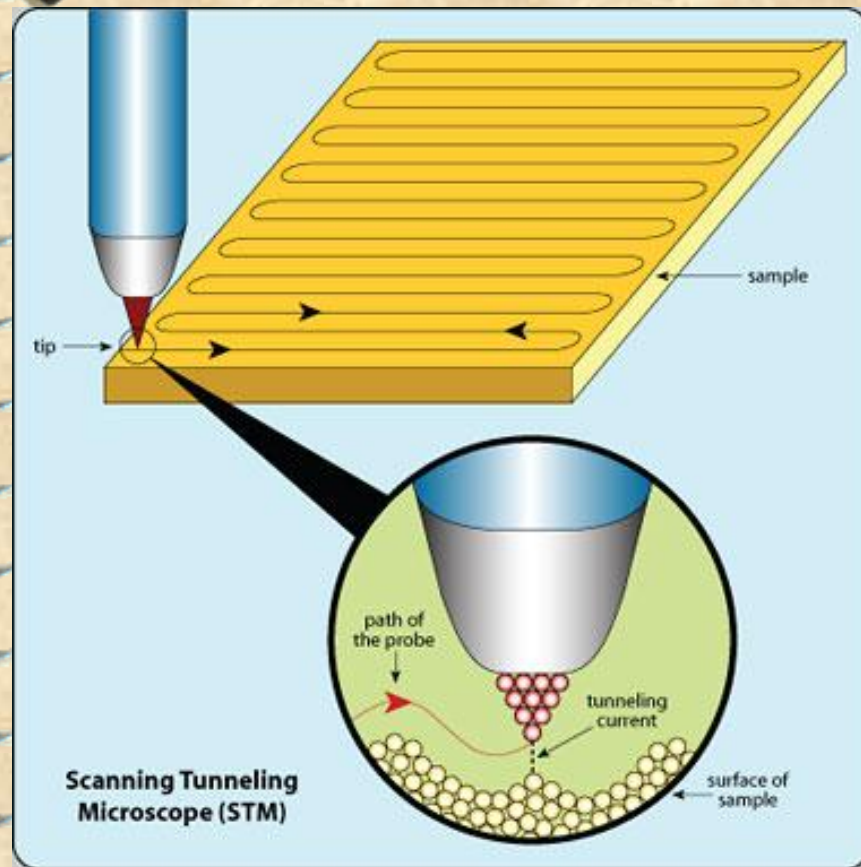


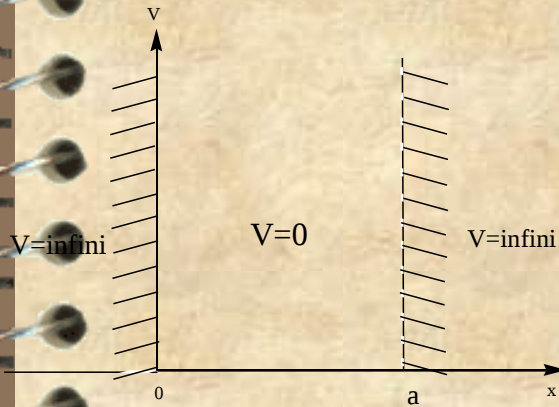
Coefficient de réflexion

$$\frac{A_r}{A_i} = r = \frac{(k_0^2 - k_1^2) \sin(ak_1)}{2ik_0k_1 \cos(ak_1) + (k_0^2 + k_1^2) \sin(ak_1)}.$$

Réflexion totale si $A_i = A_r$. La probabilité de réflexion : $|r|^2$ est non nulle, même lorsque l'énergie de la particule est supérieure à V_0 ! (non classique)

Applications : microscope à effet tunnel





La particule ne peut pas se trouver dans la région où V est infini, car elle aurait alors une énergie infinie. Sa densité de probabilité de présence doit donc y être nulle et l'on a :

$$\varphi(x) = 0 \quad \text{si} \quad x \leq 0 \text{ ou } x \geq a$$

Dans la région entre 0 et a , le potentiel est nul et l'énergie est uniquement cinétique. L'hamiltonien s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \underbrace{V(x)}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

Il faut donc résoudre l'équation de Schrödinger suivante :

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

Les solutions de cette équation différentielle sont de la forme :

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \sin kx \\ \varphi(x) &= \cos kx \end{aligned} \quad \text{avec} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \text{ et donc } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Il y a donc une solution générale (entre 0 et a):

$$\varphi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

Pour déterminer A et B, il faut introduire d'autres données :
les conditions aux limites

Il faut avant cela, préciser une propriété que doivent posséder les fonctions d'onde :

- Les fonctions d'ondes sont des fonctions continues
- La dérivée première d'une fonction d'onde est continue.

Ceci doit être vrai aux points 0 et a.

Continuité de la fonction :

$$\varphi(0) = 0 \quad (\text{coté } V=\text{infini})$$

$$\varphi(0) = A\sin(0) + B\cos(0) = B \quad (\text{coté } V=0)$$

donc

$$B = 0$$

$$\varphi(a) = 0 \quad (\text{coté } V=\text{infini})$$

$$\varphi(a) = A\sin(ka) + B\cos(ka) = A\sin(ka) \quad (\text{coté } V=0)$$

0

donc $A\sin(ka) = 0$

Mais $A \neq 0$ sinon la fonction serait nulle partout (non physique)

donc $\sin ka = 0$

$$\Rightarrow k = k_n = \frac{n\pi}{a} \quad n = 1, 2, \dots, \infty \quad (n=0 ?)$$

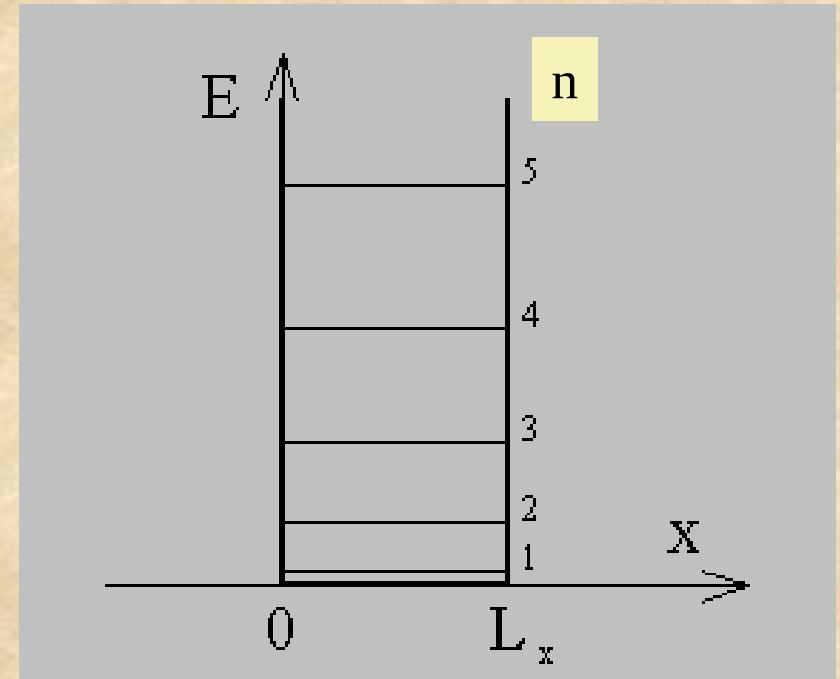
Comme E dépend de n, on a :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2ma^2} \quad n = 1, 2, \dots, \infty$$

L'énergie est
Quantifiée !!!
(dépend d'un entier)

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2ma^2} \quad n = 1, 2, \dots, \infty$$

- Les niveaux s'éloignent les uns des autres lorsque n augmente
- L'énergie minimale n 'est pas nulle ! C'est **l'énergie de point zéro**. Ceci a des conséquences très importantes en physique statistique et n 'a pas d'équivalent « classique ».
- Lorsque a augmente, les niveaux se resserrent. Lorsque a tend vers l'infini la quantification disparaît.



normalisation des fonctions propres :

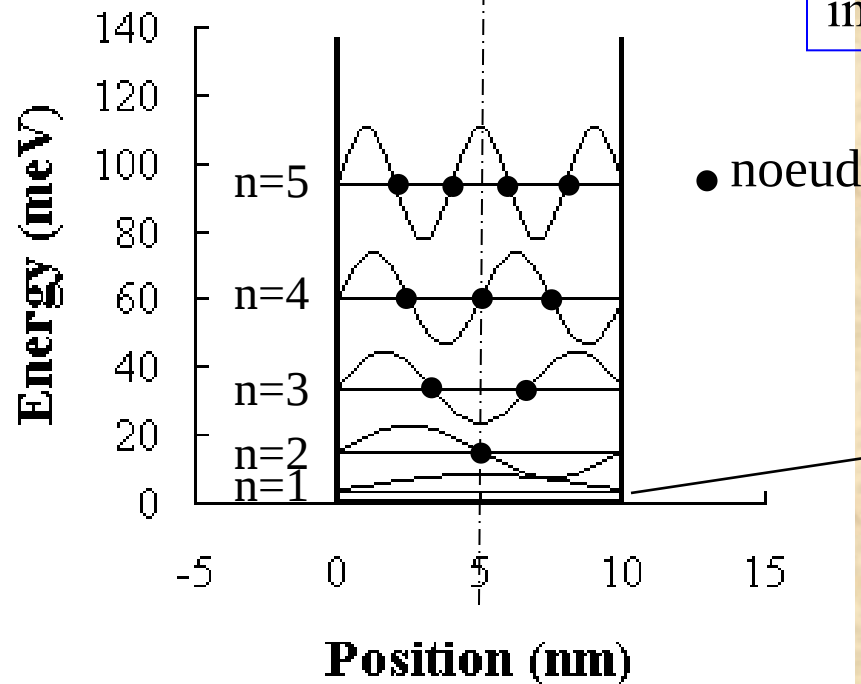
Il ne reste qu'à déterminer la valeur de A afin que la fonction soit normalisée :

$$\varphi_n = A \sin(k_n x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

$$\begin{aligned} |\varphi_n|^2 &= A^2 \int \sin^2(k_n x) dx \\ &= A^2 \int \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \\ &= A^2 \frac{a}{2} \end{aligned}$$

On veut que $A^2 \frac{a}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$

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

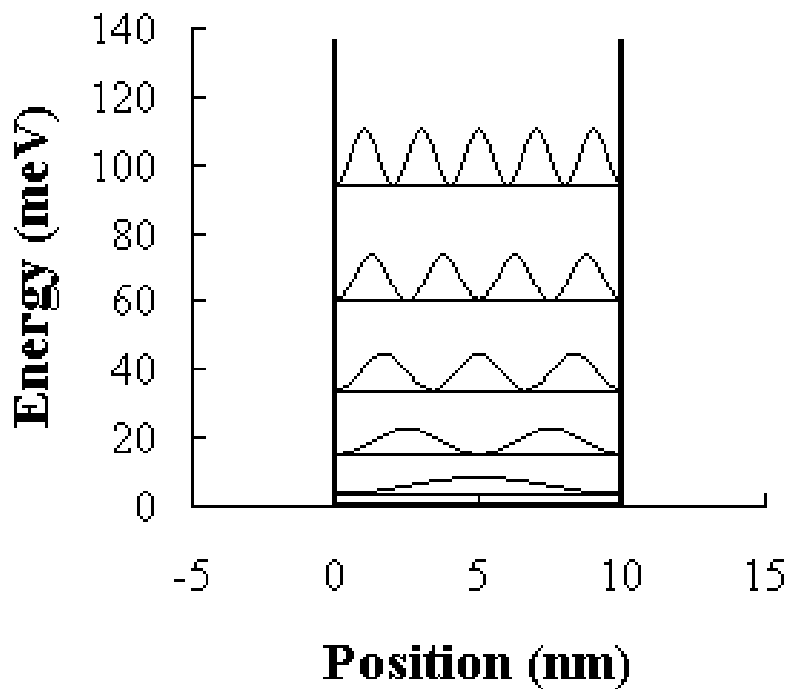


Il y a alternance de fonctions paires et impaires par rapport à l'axe du puit.

Il y a n-1 nœuds dans chaque fonction

Etat fondamental

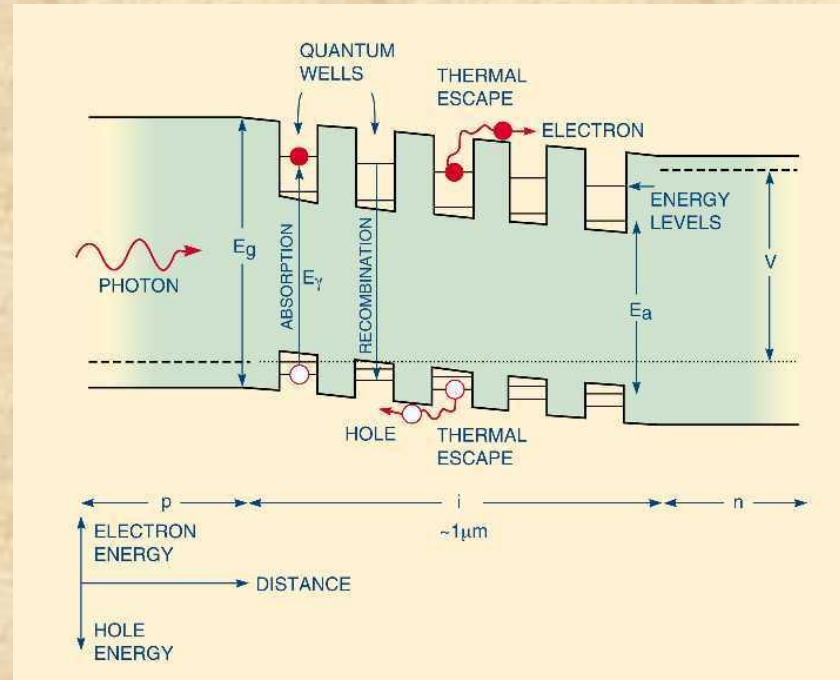
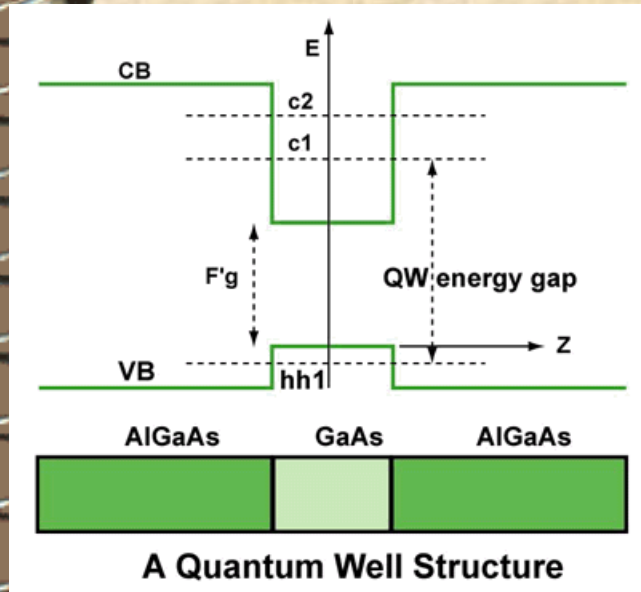
Densité de probabilité : $|\varphi_n|^2$



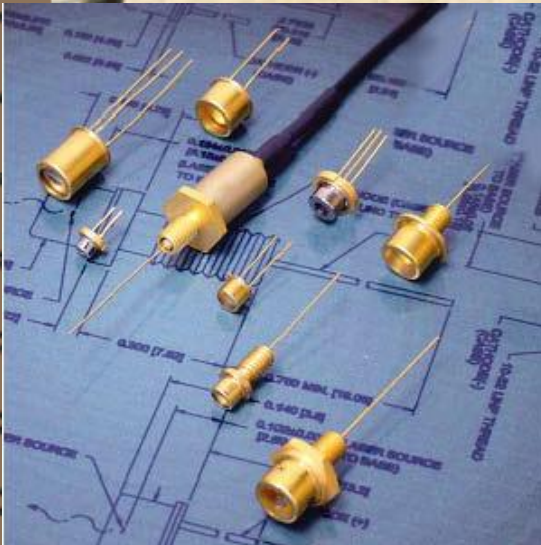
La densité de probabilité est nulle aux nœuds de la fonction d'onde.

La mesure de la position de la particule montrera qu'elle a des zones « privilégiées » d'existence en fonction de son énergie.

Applications : microélectronique



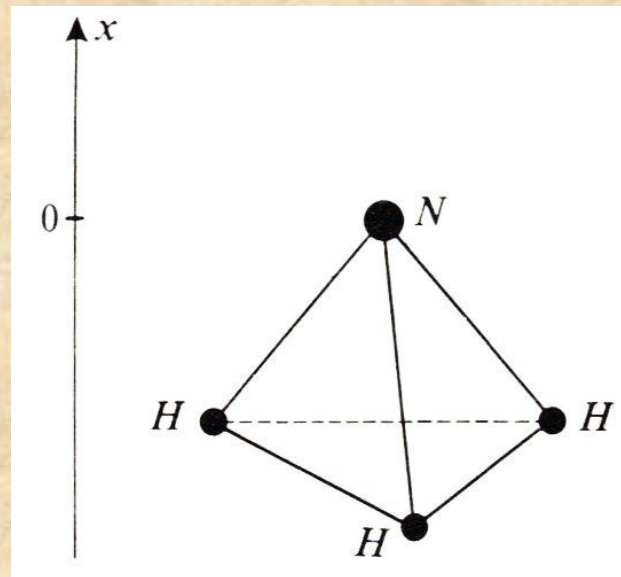
Laser Diode Incorporated's CVD series lasers are strained layer quantum well devices fabricated by the MOCVD process. These pulsed lasers are available with up to 140W of peak power at either 850nm or 905nm.

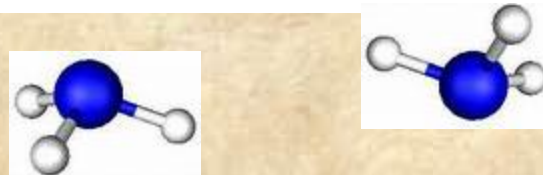
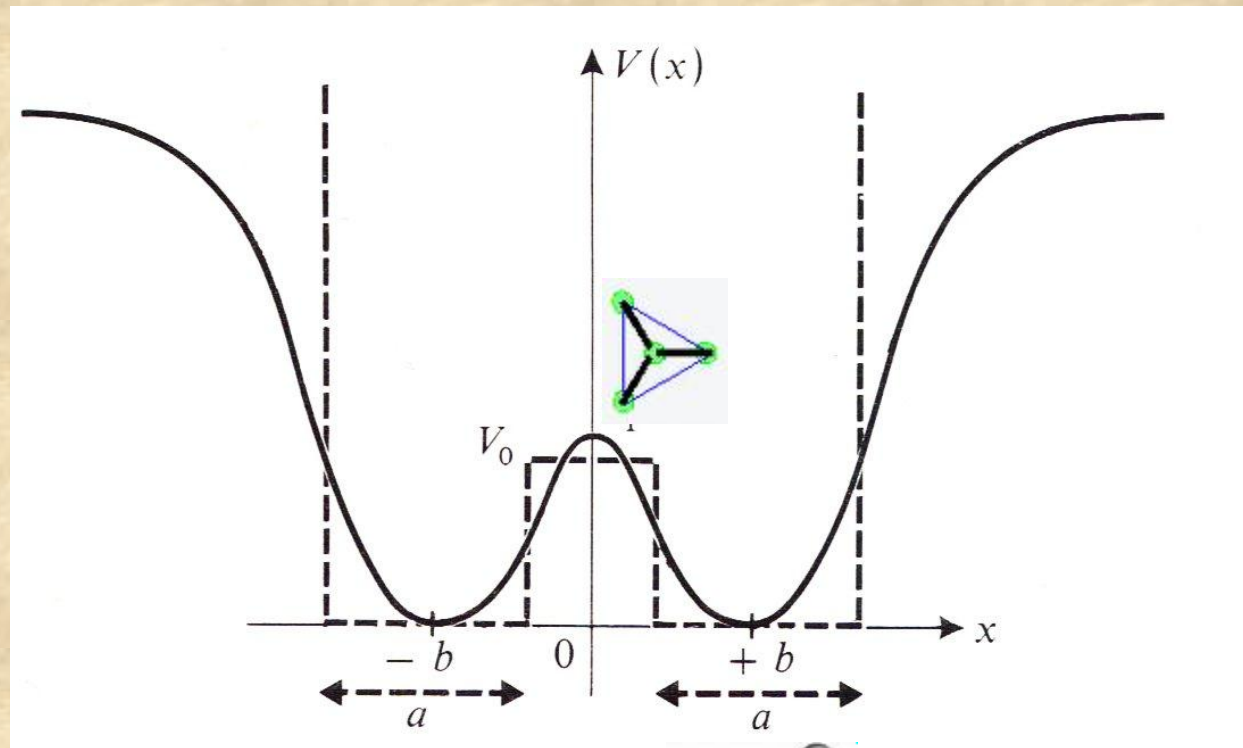


Analogie avec les cordes vibrantes

3) Inversion de l'ammoniac

L'inversion de l'ammoniac peut être représentée en considérant la coordonnée d'inversion x qui est la distance (signée) entre le plan engendré par les trois hydrogènes et l'azote ; $x=0$ correspond à la molécule plane.





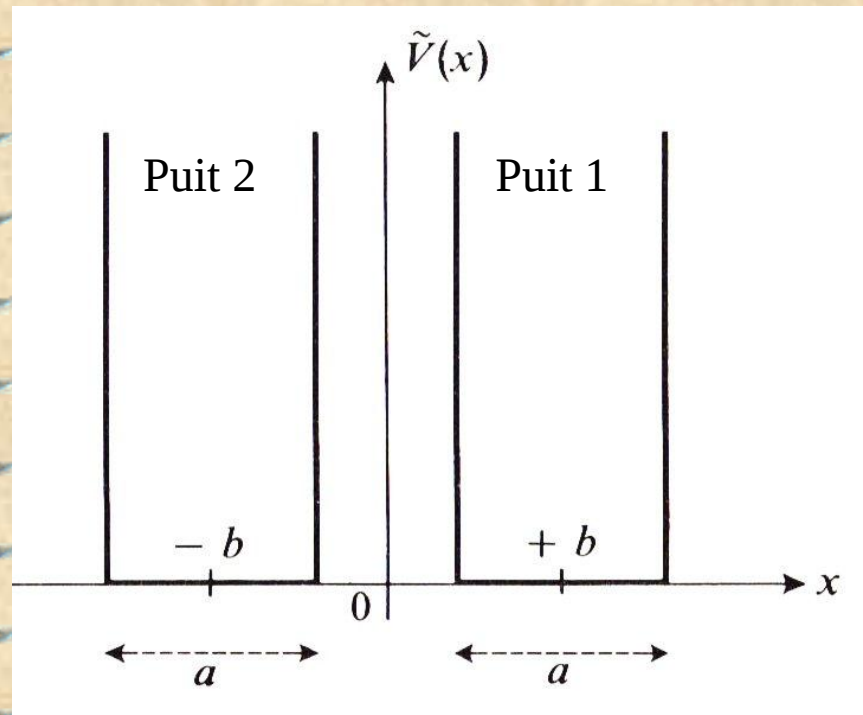
Le potentiel réel suivant la coordonnée d'inversion (ligne continue) peut être modélisé par un double puit (ligne pointillée). Les puits sont de largeur a et sont centrés en $+b$ et $-b$.

Si la barrière d'inversion est infinie, on se retrouve avec les solutions du système étudié précédemment :

Puit 1 $\varphi_1^n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n(b+a/2-x))$ si $b-a/2 \leq x \leq b+a/2$

Puit 2 $\varphi_2^n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n(b+a/2+x))$ si $-b-a/2 \leq x \leq -b+a/2$

avec $k_n = \frac{n\pi}{a}$



Énergie :

$$E_n = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2ma^2} \quad n=1,2,\dots,\infty$$

Dans chaque puit

m : masse réduite

$$m = \frac{m_N \times 3m_H}{m_N + 3m_H}$$

Nous allons utiliser une propriété très importante en mécanique quantique.

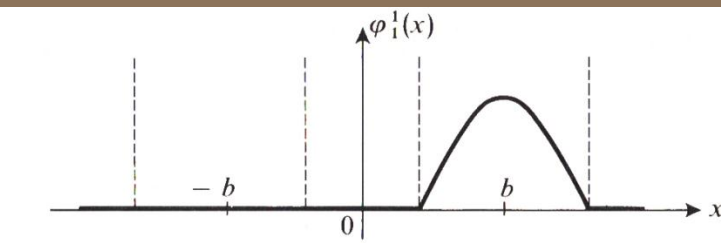
Si un opérateur, A , a plusieurs fonctions propres associées à la même valeur propre, E , (on dit que cette valeur propre est dégénérée), toute combinaison linéaire de ces fonctions est également fonction propre de l'opérateur, pour la même valeur propre.

Démonstration avec 2 fonctions

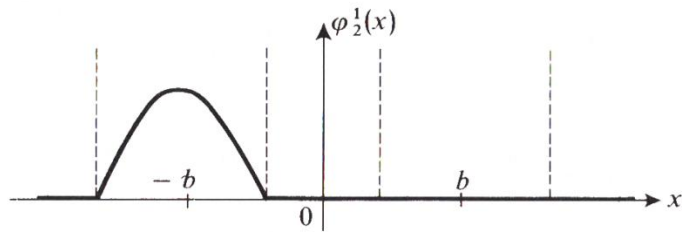
$$\forall \psi = E \psi$$

$$\forall \phi = E \phi$$

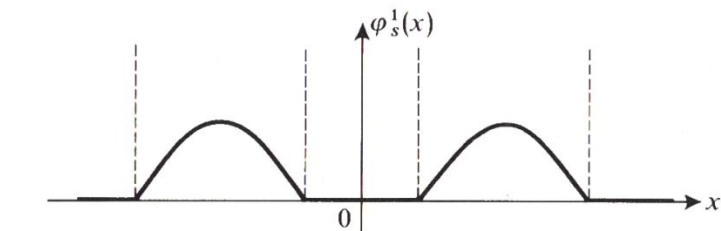
$$A(\alpha \psi + \beta \phi) = \alpha A\psi + \beta A\phi = \alpha E\psi + \beta E\phi = E(\alpha \psi + \beta \phi)$$



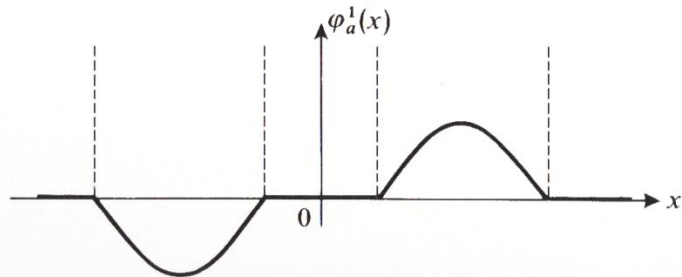
φ_1 Etat fondamental du puit 1



φ_2 Etat fondamental du puit 2



$\varphi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_1 + \varphi_2]$ Fonction symétrique

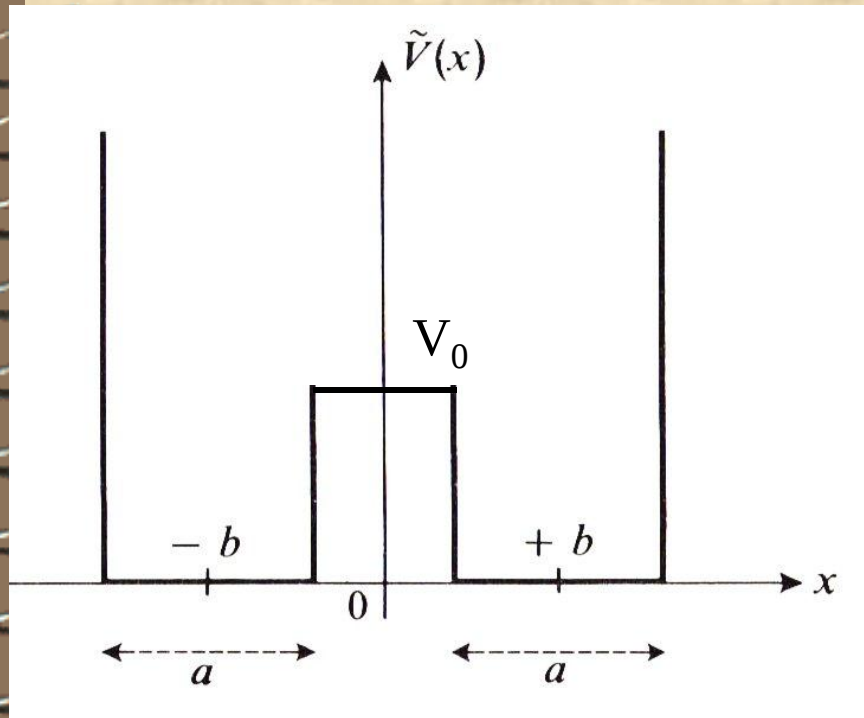


$\varphi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_1 - \varphi_2]$ Fonction antisymétrique

NB : les fonctions φ_s et φ_a sont également orthogonales

$$\int \varphi_s^* \varphi_a = \frac{1}{2} \int [\varphi_1^* + \varphi_2^*] [\varphi_1 - \varphi_2] = \frac{1}{2} \left(\int \varphi_1^* \varphi_1 + \int \varphi_1^* \varphi_2 - \int \varphi_2^* \varphi_1 - \int \varphi_2^* \varphi_2 \right) = 0$$

$\downarrow$ $\downarrow$ $\downarrow$ $\downarrow$
 1 0 0 1



Les solutions que l'on va obtenir pour le double puit avec barrière finie seront également symétriques ou antisymétriques. Car les deux conformations de NH_3 sont indiscernables $\Rightarrow |\varphi|^2$ doit être symétrique

On recherche les états d'énergie $E < V_0$

$$\varphi_1 = A \sin(k(b + a/2 - x)) \quad \text{si } b - a/2 \leq x \leq b + a/2$$

$$\varphi_2 = A' \sin(k(b + a/2 + x)) \quad \text{si } -b - a/2 \leq x \leq -b + a/2$$

Dans les puits

Solution symétrique : $A_s = A'_s$

Antisymétrique : $A_a = -A'_a$

A l'intérieur de la barrière, on a vu qu'il y avait une décroissance exponentielle de la fonction d'onde à partir de chaque extrémité de la forme :

$$\varphi = Be^{qx} \quad \text{avec} \quad q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}V_0 - k^2}$$

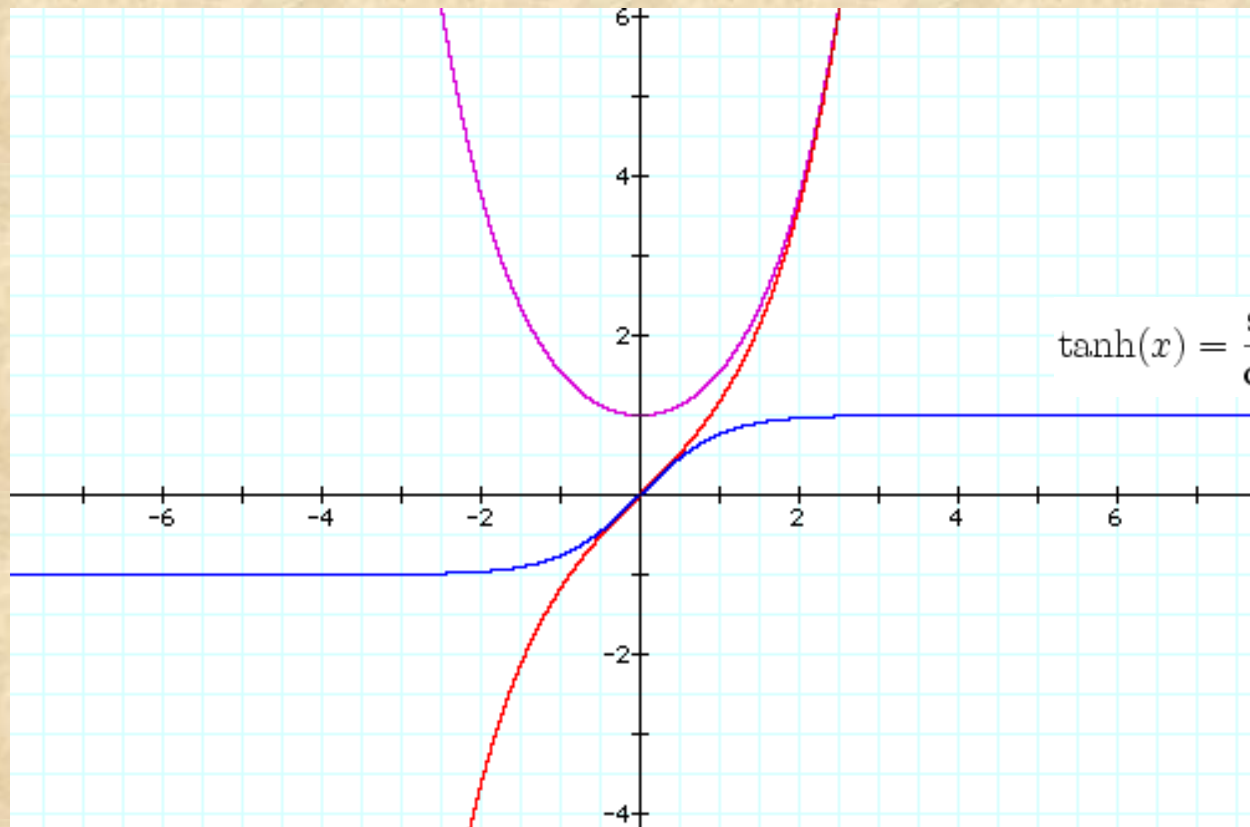
Solution symétrique :

$$\varphi_s = B_s e^{-q(-b+a/2+x)} + B_s e^{-q(-b+a/2-x)} = B_s e^{-q(-b+a/2)} \cosh(qx)$$

Solution antisymétrique :

$$\varphi_a = B_s e^{-q(-b+a/2+x)} - B_s e^{-q(-b+a/2-x)} = B_s e^{-q(-b+a/2)} \sinh(qx)$$

$$\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$$



$$\tanh(x) = \frac{\sinh(x)}{\cosh(x)} = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$

$$\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

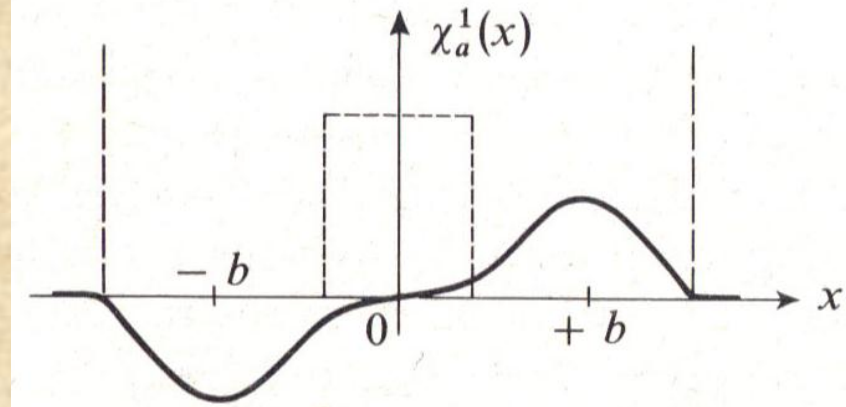
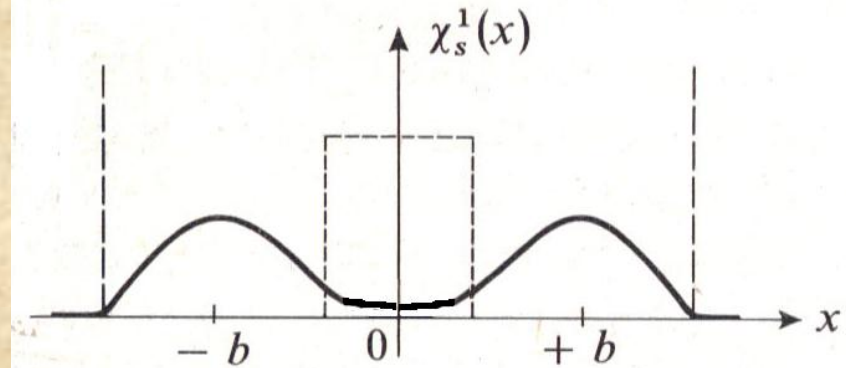
Rappel : Les fonction hyperboliques

En écrivant les conditions aux limites de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée, on obtient ces fonctions.

Il apparaît une condition sur les valeurs possibles de k , différente suivant que l'on ait une fonction symétrique ou antisymétrique :

$$\operatorname{tg}(k_s a) = \frac{-k_s}{\sqrt{\alpha^2 - k_s^2}} \coth \left[\sqrt{\alpha^2 - k_s^2} \left(b - \frac{a}{2} \right) \right]$$

$$\operatorname{tg}(k_a a) = \frac{-k_a}{\sqrt{\alpha^2 - k_a^2}} \operatorname{th} \left[\sqrt{\alpha^2 - k_a^2} \left(b - \frac{a}{2} \right) \right]$$



$$k_s \neq k_a \Rightarrow E_s \neq E_a$$

Ces fonctions n'ont pas la même énergie !

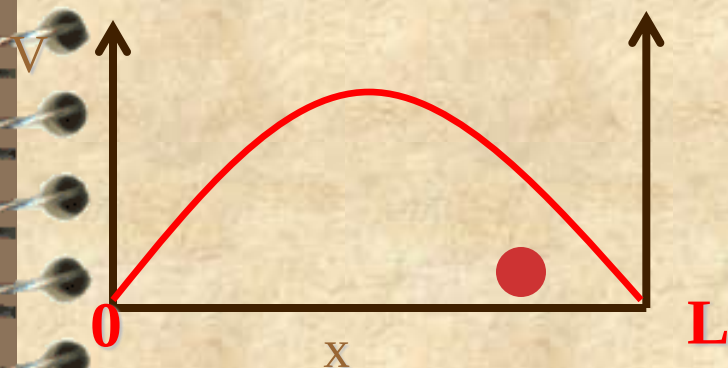
Applet de visualisation des niveaux d'énergie :

<http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/en/pages/p0204.html>



Un exemple d'une fonction d'onde

• Particule dans une boîte:



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

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

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

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

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

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

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

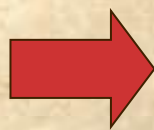


$$\frac{4}{L} \sin\left(\pi \frac{x}{L}\right) \cos\left(\pi \frac{x}{L}\right) \frac{\pi}{L} = 0$$

Un exemple d'une fonction d'onde

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

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



$P^{\max}$ est à $x = L/2$

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

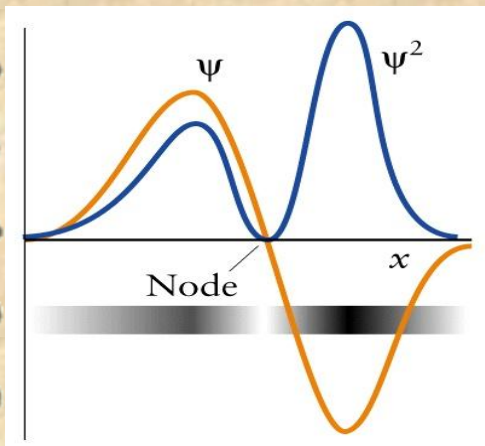
Remarque: dans le cas classique la probabilité est la même pour tous les x ! $P(x)$ est constante!!

Espérance et écart type

Mécanique quantique:

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$P^{tot} = 1$$

Equation d'onde pour les particules

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

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

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

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

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

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

C'est la célèbre équation de Schrödinger

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

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

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

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

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

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

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

Energie cinétique
de la particule

Energie potentielle
de la particule

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

$$\Psi(r, t)$$

Planck's constant

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

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

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

The mass of the particle
being described

Describes the forces
acting on the particle

Describes how Ψ
changes its shape
with time

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

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

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

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

&

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

Soit encore :

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

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

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

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

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

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

Cette équation admet pour solution :

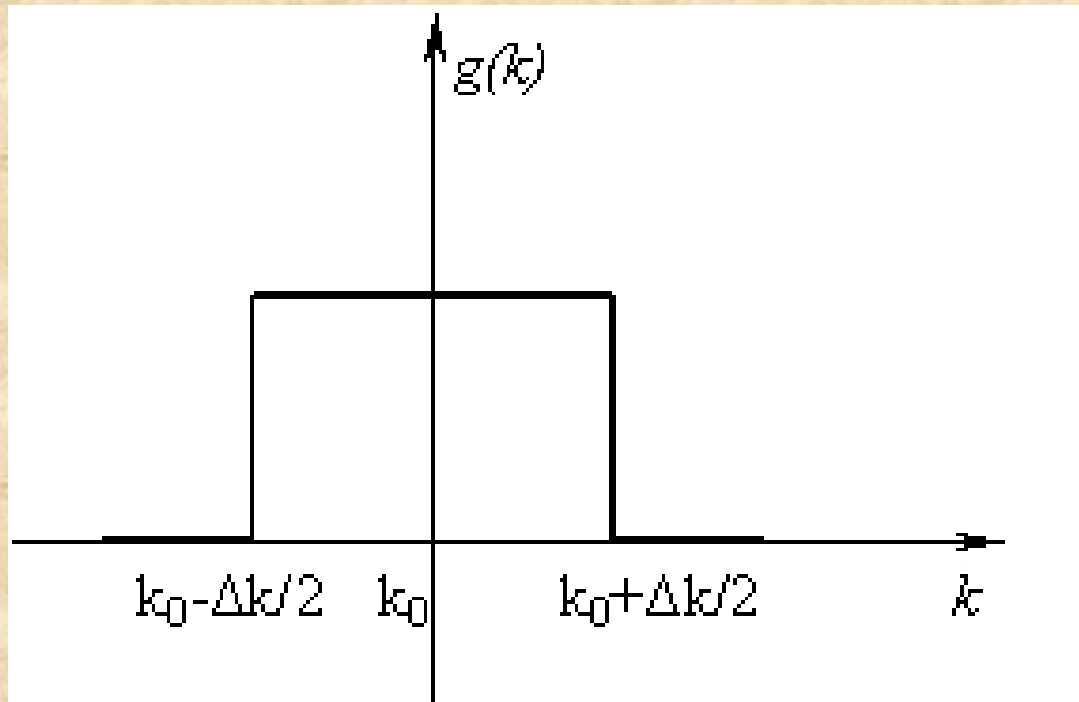
$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$$

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

Exemple : Paquet d'ondes carré

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

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



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

Comparaison physique classique/quantique

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

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

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



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



A. Piccard, E. Henriot, P. Ehrenfest, E. Herzen, Th. De Donder, **E. Schrödinger**, F. Verschaefelt, **W. Pauli**, **W. Heisenberg**, R. Fowler, **L. Brillouin**,
 P. Debye, M. Knudsen, **W. Bragg**, H. Kramers, J. Dirac, A. Compton, **L. de Broglie**, M. Born, N. Bohr,
 I. Langmuir, **M. Planck**, M. Curie, H. Lorentz, **A. Einstein**, P. Langevin, Ch. Guye, Ch. Wilson, O. Richardson