

# Mécanique quantique

« *La plus exacte et la plus mystérieuse de toutes les théories physiques* » (Penrose)

« *Personne ne comprend vraiment la mécanique quantique* » (R Feynman)

« *Puisque c'est ça, je me lance dans le café soluble qualité filtre* » (Maxwell, d'après [A Astier](#))



*O Granier*

PC\* (Lycée J Decour, Paris)



### **3 mots clés pour décrire la mécanique classique :**

*trajectoire, déterminisme et causalité*

Le principe de causalité affirme que si un phénomène (nommé cause) produit un autre phénomène (nommé effet), alors l'effet ne peut précéder la cause.

Un effet est entièrement déterminé par des actions antérieures.

Le principe de causalité a longtemps été très étroitement associé à la question du déterminisme, selon lequel dans les mêmes conditions, les mêmes causes produisent les mêmes effets.

### **3 mots clés pour décrire la mécanique quantique :**

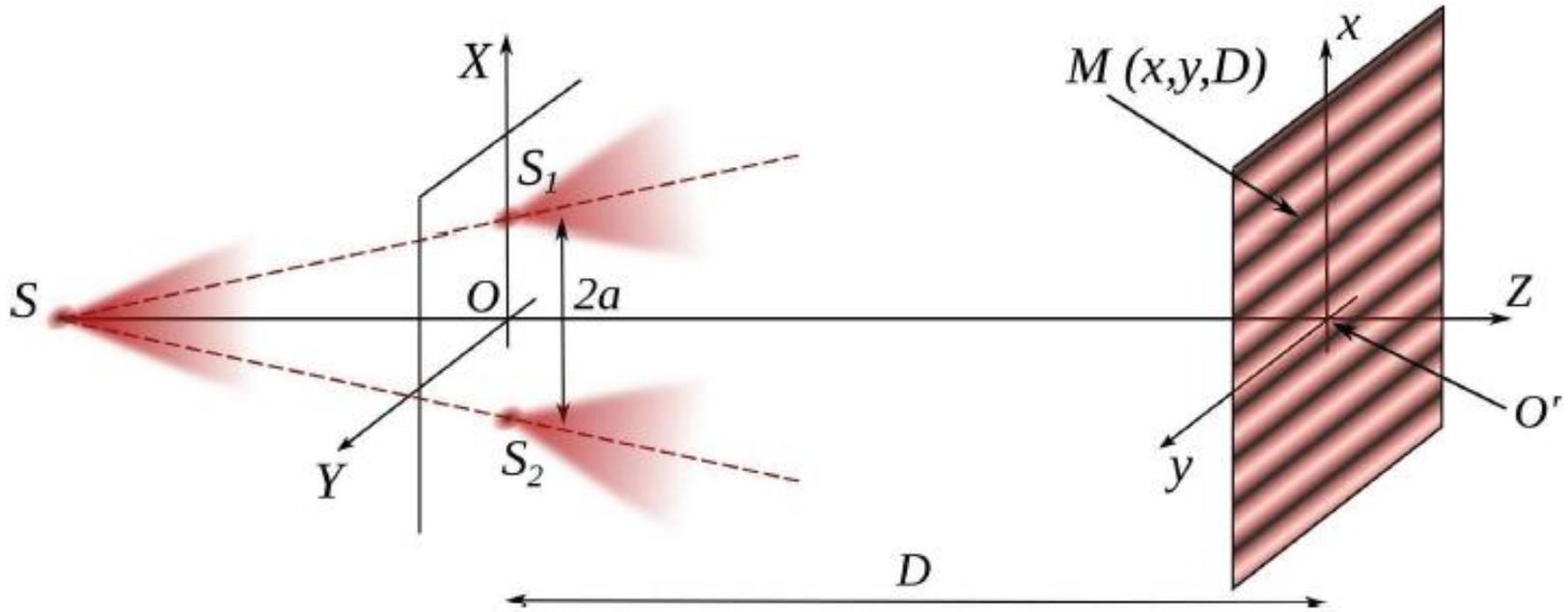
*dualité, indétermination et quantification*

*Onde ou particule, c'est l'absence de représentation plus adéquate de la réalité des phénomènes qui nous oblige à adopter, selon le cas, un des deux modèles alors qu'ils semblent antinomiques.*

# I. La fonction d'onde de probabilité



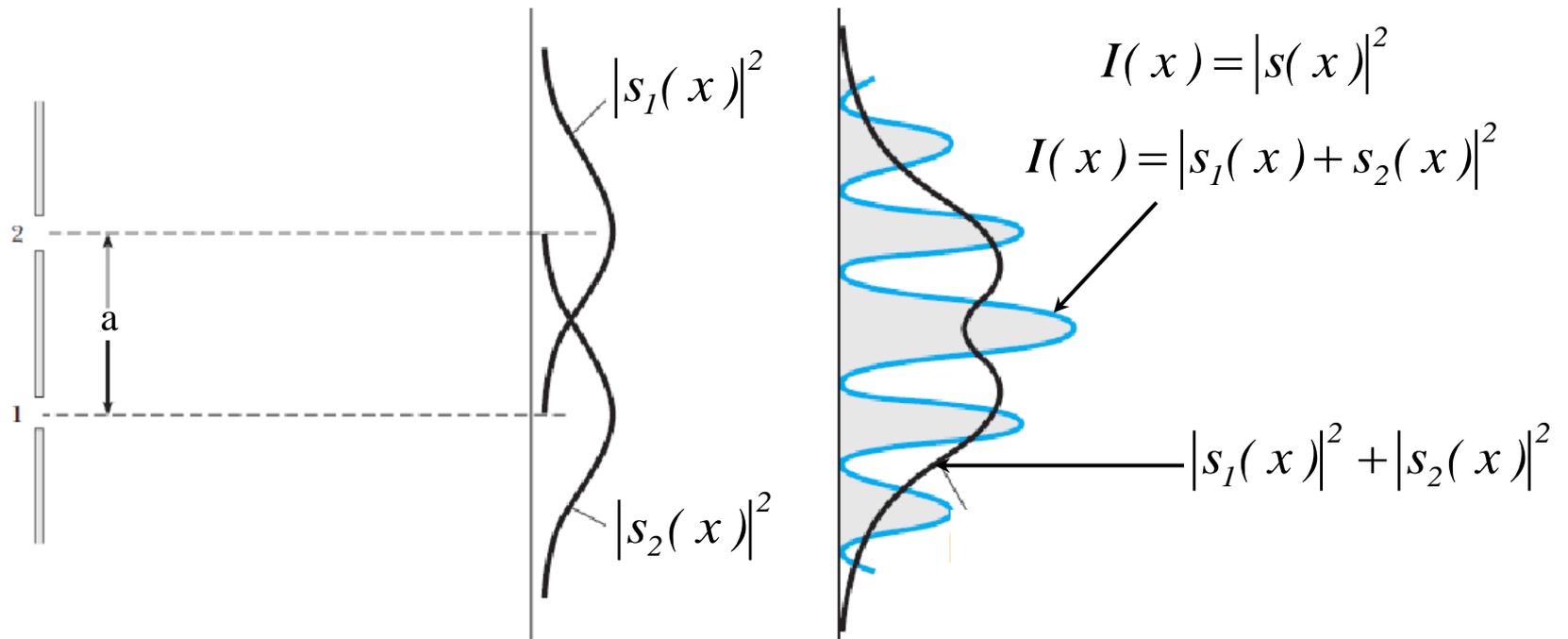
# 1. Le Photon : aspect ondulatoire



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

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

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



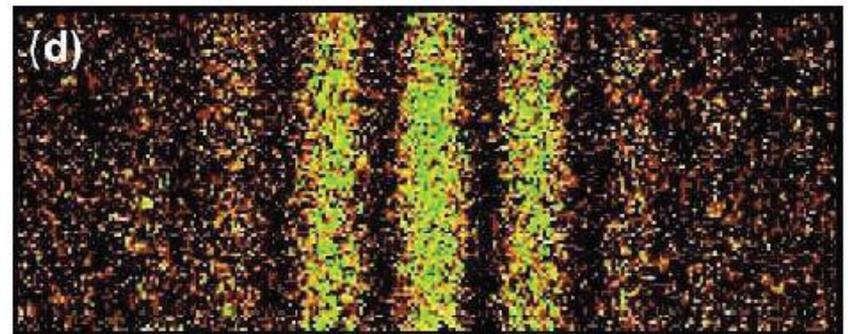
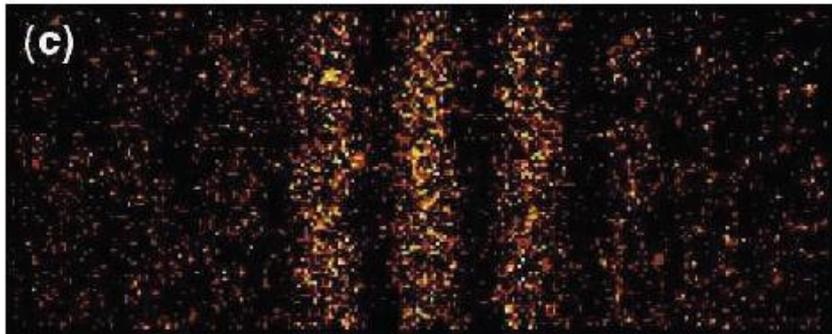
La source lumineuse a émis  $N_0$  photons. L'intensité de la source est  $I_0$ .

Soit  $n(x)$  le nombre de photons qui arrivent au point M de coordonnées  $x$  sur l'écran.

La proportion de photons,  $P(x)$ , au point M est alors :

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

La probabilité de trouver un photon en  $x$  est donc proportionnelle à  $|s(x)|^2$ .

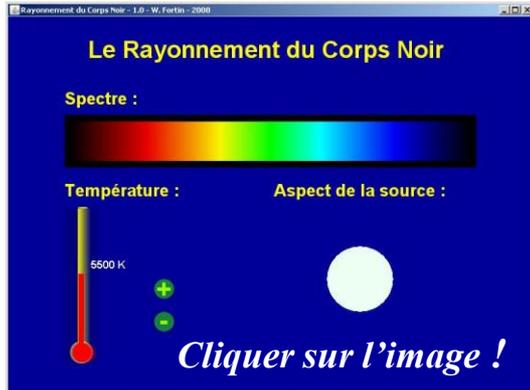
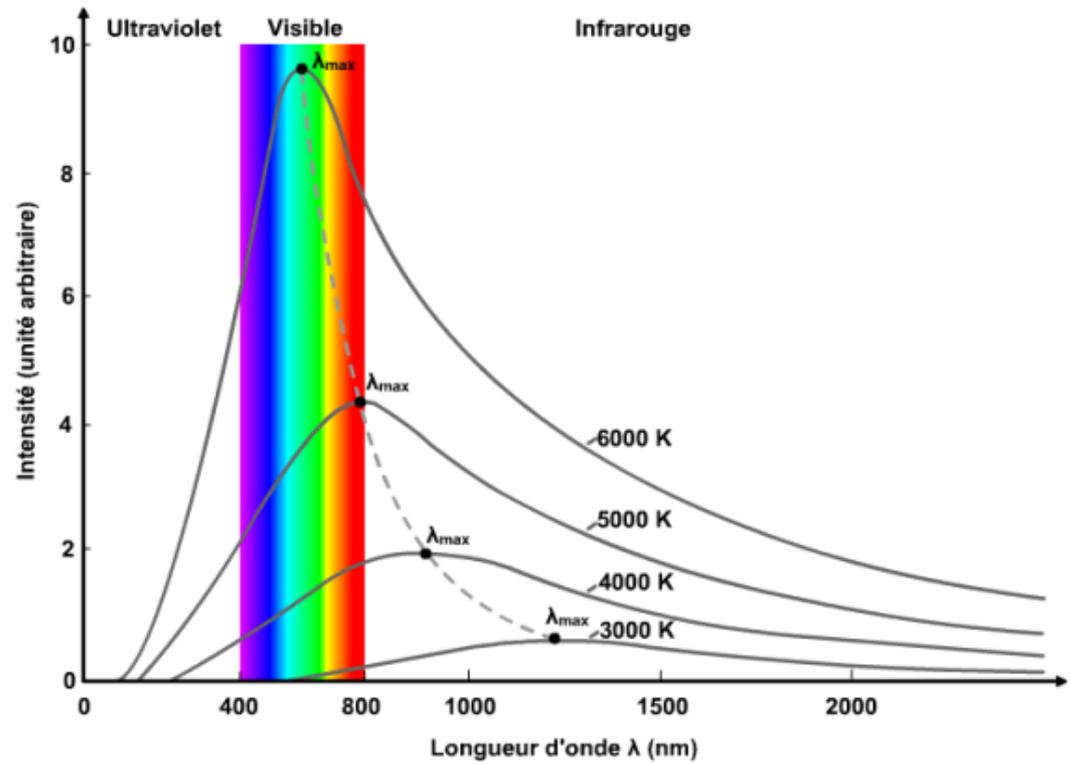
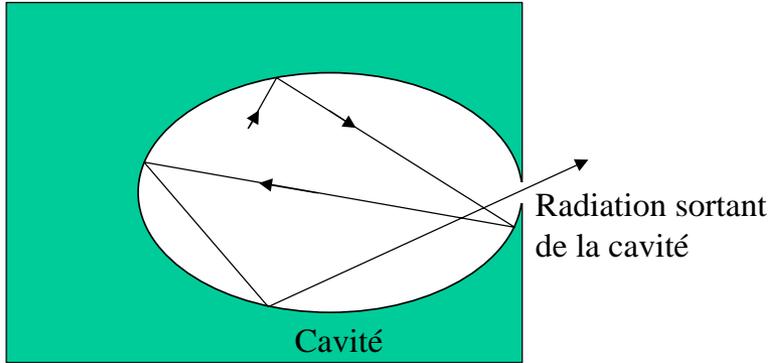


*Expérience des fentes d'Young, photon par photon*

*Voir la vidéo d'Alain Aspect : cliquer [ICI](#)*

*Un exercice autour des fentes d'Young : cliquer [ICI](#)*

# Le rayonnement du corps noir :



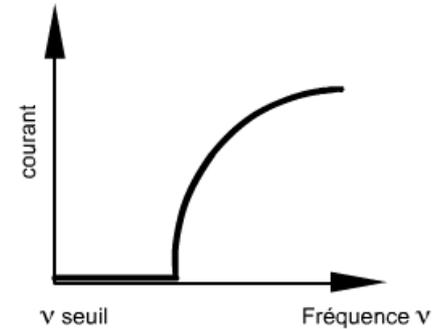
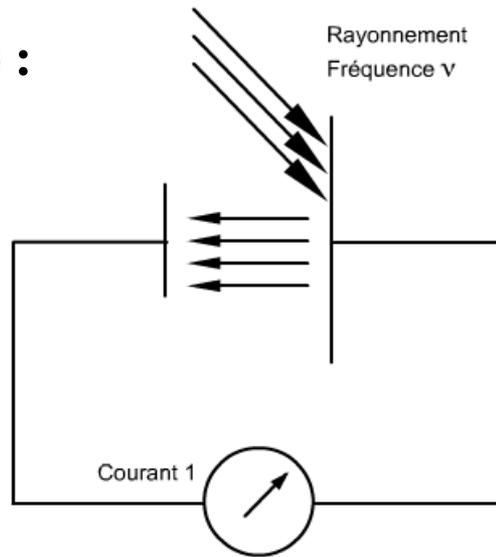
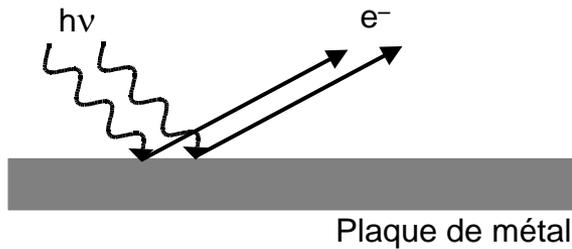
Loi de Wien :

$$\lambda_{max} = \frac{2,898 \cdot 10^{-3}}{T} m$$

Densité de flux d'énergie :  
( $\sigma$  est la constante de Stefan)

$$\Phi_E = \sigma T^4$$

## L'effet photoélectrique (1887) :



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

- En dessous d'une certaine valeur seuil de la fréquence du rayonnement, notée  $\nu_0$ , aucun électron n'est émis
- L'émission d'électrons n'est pas conditionnée par l'intensité du rayonnement mais uniquement par sa fréquence.  
Si on augmente l'intensité du rayonnement à une fréquence inférieure au seuil d'émission des électrons, aucun électron n'est émis.

Les électrons se trouvent dans un état lié au sein des atomes.

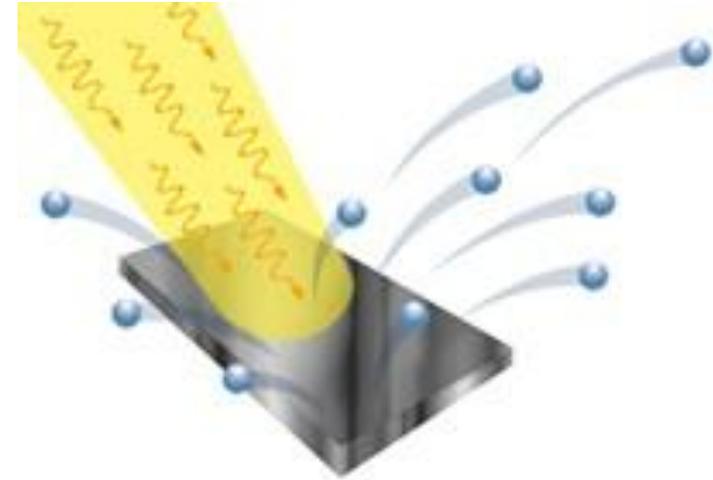
La valeur de l'énergie de liaison est une caractéristique propre à chaque élément, elle est notée  $E_0$ .

L'énergie cinétique des électrons émis vaut (Einstein en 1905) :

$$h\nu = E_0 + E_c \quad \text{soit} \quad E_c = h\nu - E_0$$

La fréquence seuil est :

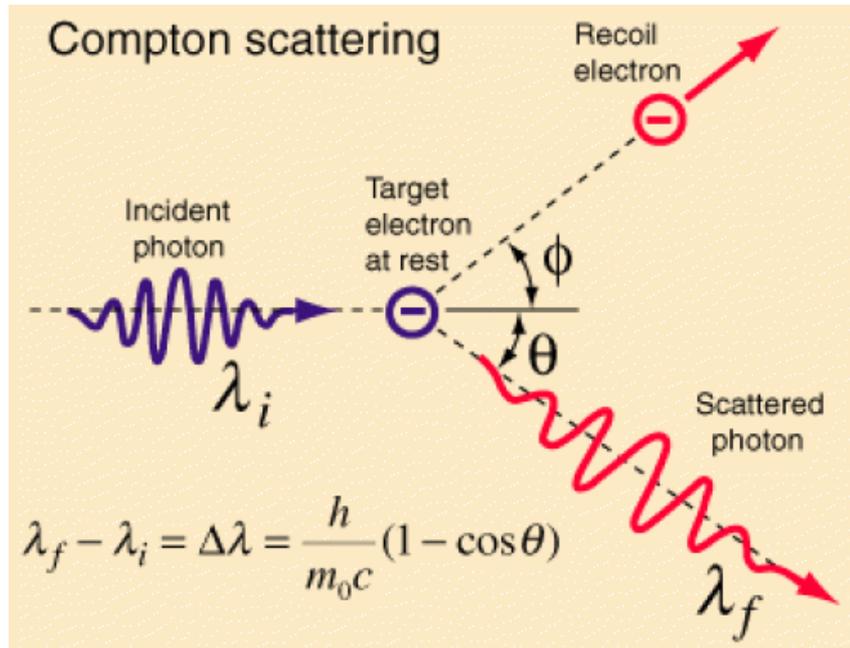
$$\nu_0 = \frac{E_0}{h}$$



La lumière est constituée de paquets d'énergie (les photons) qui sont absorbés et émis par la matière.

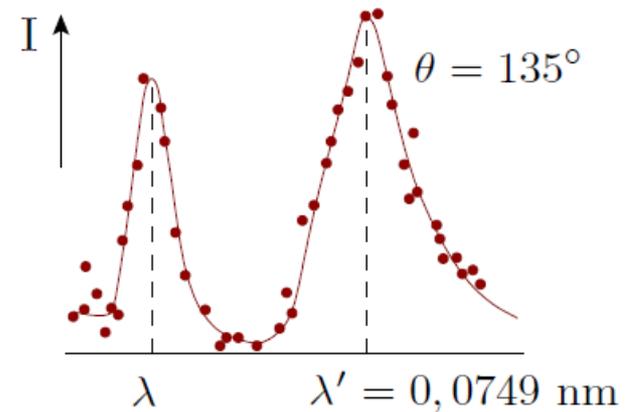
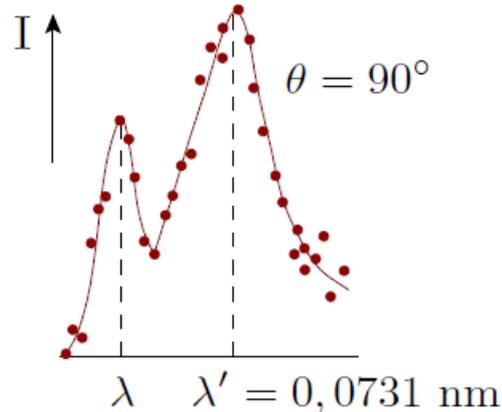
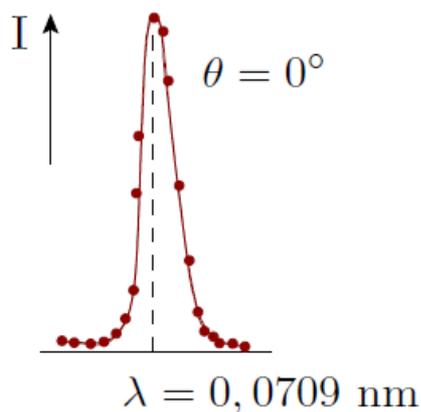
La nature discontinue des quanta n'est alors plus une propriété de l'interaction entre la matière et le rayonnement mais une caractéristique intrinsèque au rayonnement lui même.

# L'effet Compton (1923) :

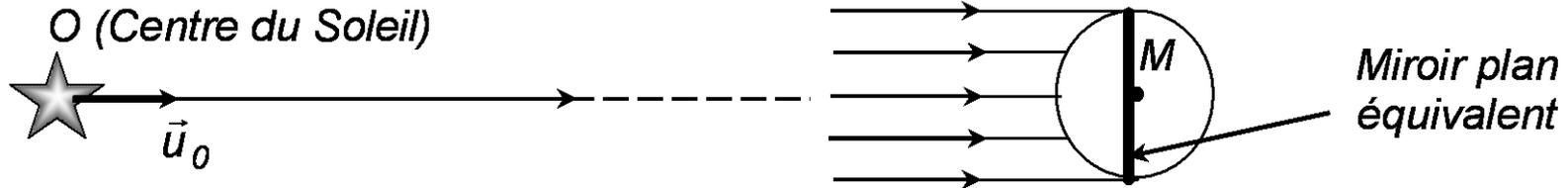


La lumière peut se comporter comme un faisceau de particules dont l'énergie est proportionnelle à la fréquence (ou inversement à la longueur d'onde) :

$$E = h\nu = hc / \lambda$$



## La pression de radiation :



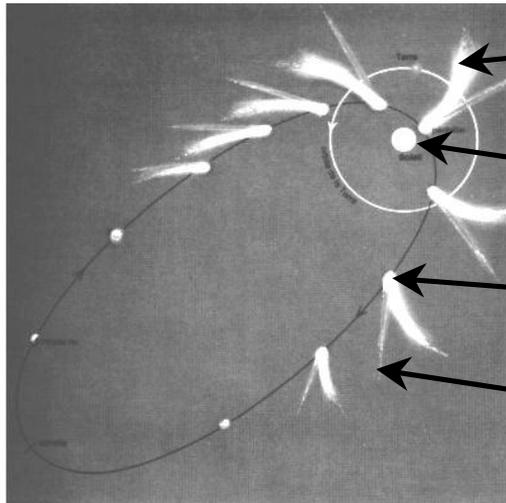
$a$  : rayon de la particule de poussière

$r$  : distance au Soleil de la particule

$P$  : puissance totale émise par le Soleil sous forme de rayonnement EM

La force moyenne exercée sur la particule est :

$$\vec{F}_R = \frac{d\vec{P}_R}{dt} = \frac{Pa_0^2}{2cr^2} \vec{u}_0$$



Queue neutre (courbée)  
de la comète

Soleil

Noyau de la comète

Queue chargée (rectiligne) de la  
comète, opposée au Soleil

## Les relations de Planck – Einstein :

Les relations entre l'aspect ondulatoire et l'aspect corpusculaire sont appelées les relations de Planck – Einstein :

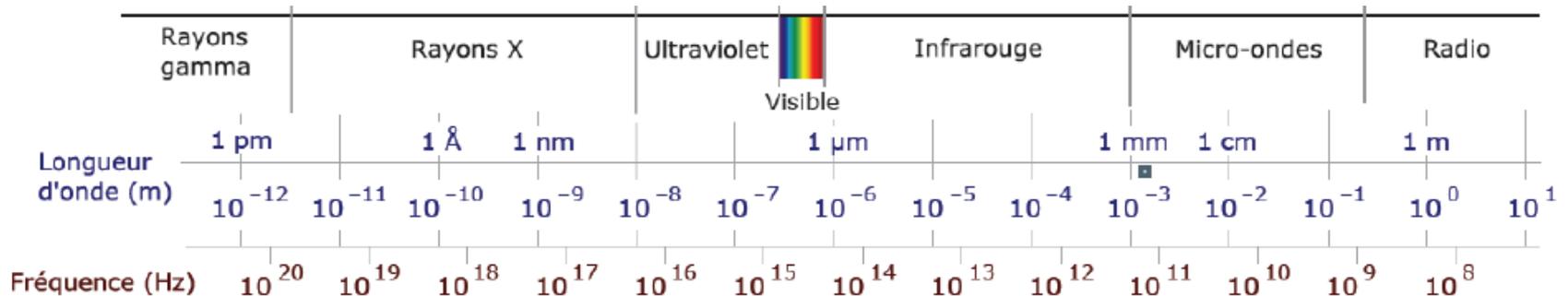
$$E = h\nu \quad ; \quad p = \frac{E}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

En utilisant la pulsation et le vecteur d'onde :

$$E = \hbar\omega \quad ; \quad p = \hbar k$$

Avec :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$$



## 2. Les ondes de matière :

### La longueur d'onde de De Broglie (1923)

On considère une particule matérielle, de masse  $m$ , de vitesse  $v$ , de quantité de mouvement non relativiste  $p = mv$  et d'énergie  $E$ .

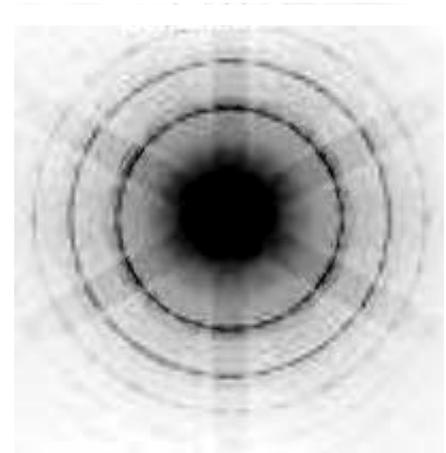
Cette particule présente un caractère ondulatoire :

• *De fréquence :*

$$\nu = \frac{E}{h} \quad (\text{ou : } E = \hbar\omega)$$

• *De longueur d'onde :*

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (\text{ou : } p = \hbar k)$$



*Figure de diffraction d'électrons dans un cristal.*

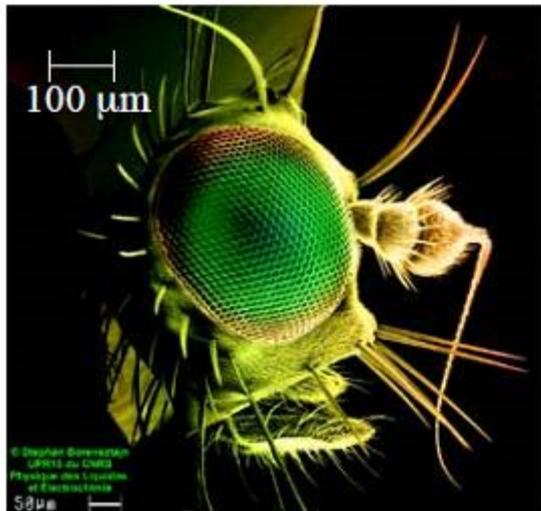
*Les particules de matière possèdent un double comportement onde-corpuscule*

*Longueurs d'ondes de quelques particules : cliquer [ICI](#)*

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



*(Tête de mouche)*



S. Borensztajn,  
CNRS

# Interférences d'électrons et de neutrons :

*L'article original de l'expérience :*

*Cliquer [ICI](#)*



*Dr Quantum, « Double fente »*

*(Cliquer sur l'image)*



*Description de l'expérience : cliquer [ICI](#)*



*Une vidéo (de 15 min) sur la dualité onde-corpuscule*

*(Cliquer sur l'image)*

### 3. Un modèle historique, le modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène :

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.

Le proton est supposé fixe et est l'origine d'un référentiel galiléen dans lequel on se place dans tout ce problème.

$$v = \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{mr}} \quad ; \quad E_m = E_c + E_p = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

Moment cinétique (par rapport au proton) de l'électron :

$$\vec{L}_O = \vec{OP} \wedge m\vec{v} = r\vec{u}_r \wedge mv\vec{u}_\theta = mr v \vec{u}_z = \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} mr} \vec{u}_z$$

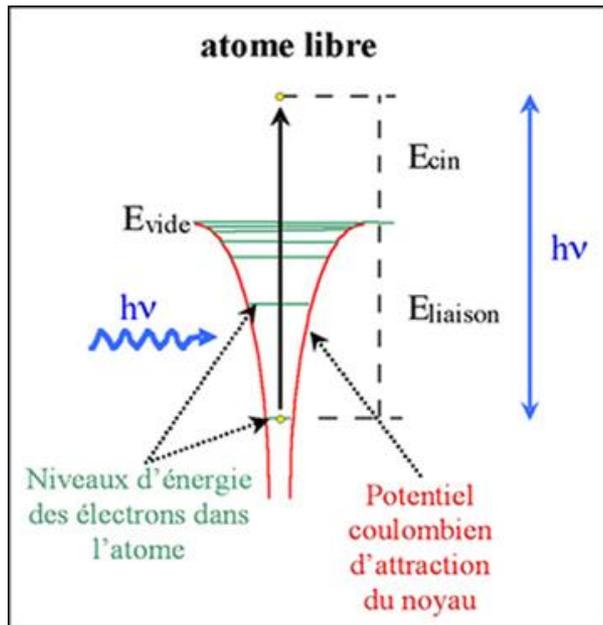
*Quantification du moment cinétique :*

$$\boxed{\sigma_O = n\hbar = n \frac{h}{2\pi}} \quad (n \text{ entier positif})$$

Le rayon et l'énergie mécanique sont quantifiés :

$$r_n = \left( \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m} \right) n^2 = r_0 n^2 \quad \text{avec} \quad r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m}$$

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



*Applications numériques :*

$$a_0 = 5,33 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

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

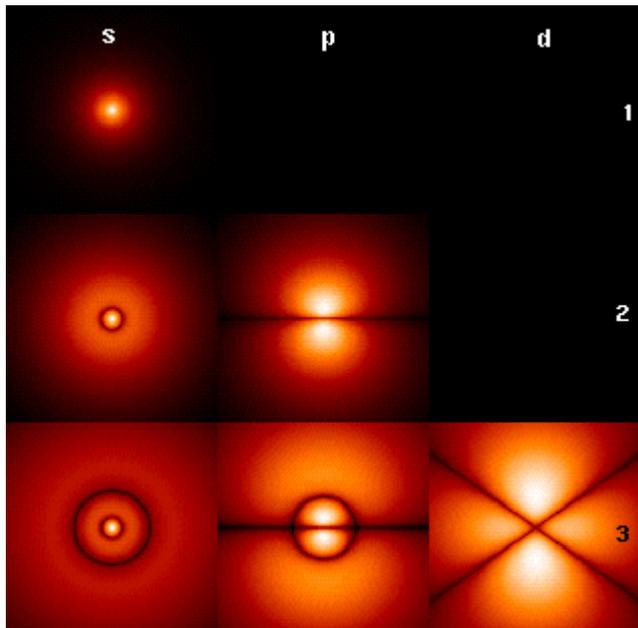
$$E_n = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV}$$

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 :

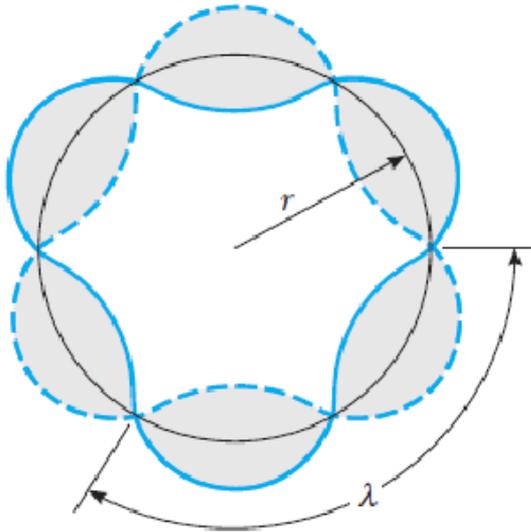
$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left[ \left( \frac{1}{4} \right) - \left( \frac{1}{n^2} \right) \right] \quad (\text{avec } n = 3, 4, 5, \dots)$$

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



*(Sections transversales des premières orbitales de l'atome d'hydrogène, le code de couleurs représentant l'amplitude de probabilité de l'électron)*

## Interprétation ondulatoire du modèle de l'atome de Bohr :



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

Si l'on attend un grand nombre de périodes, l'onde va, dans la plupart des cas, s'auto-détruire par interférence 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 :

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

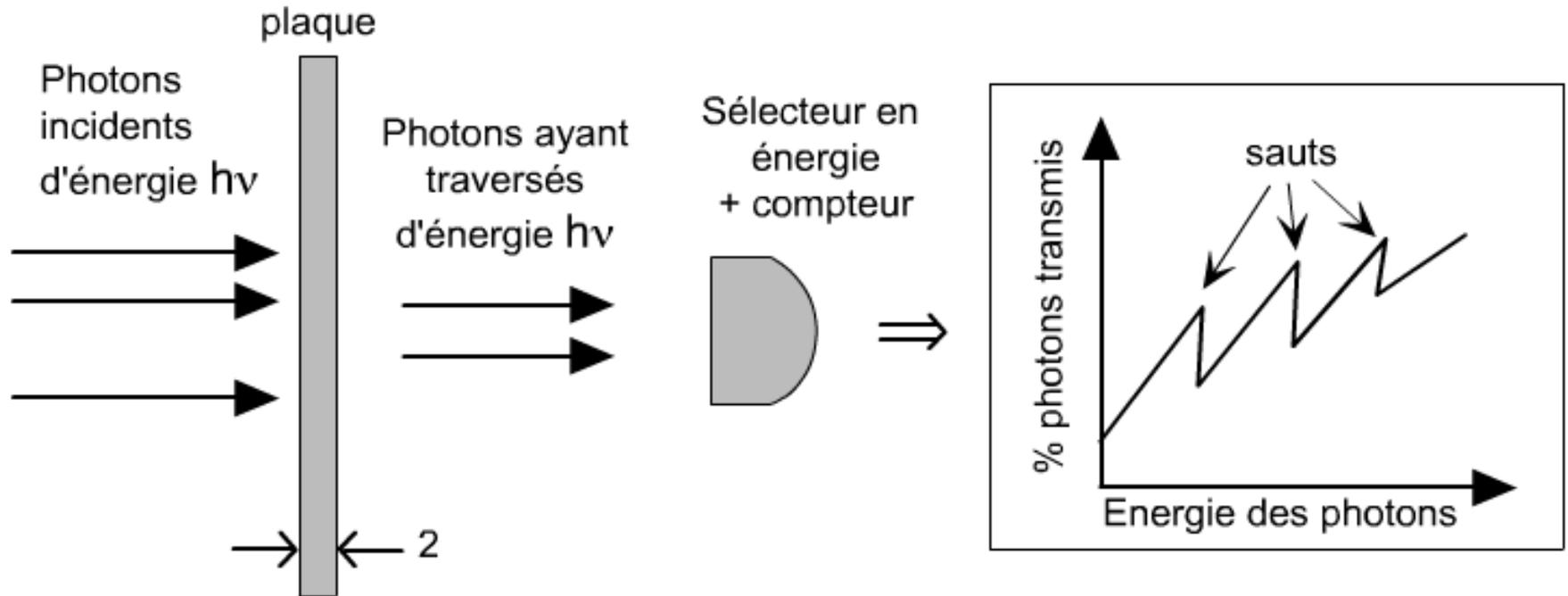
En utilisant :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

On retrouve la quantification du moment cinétique :

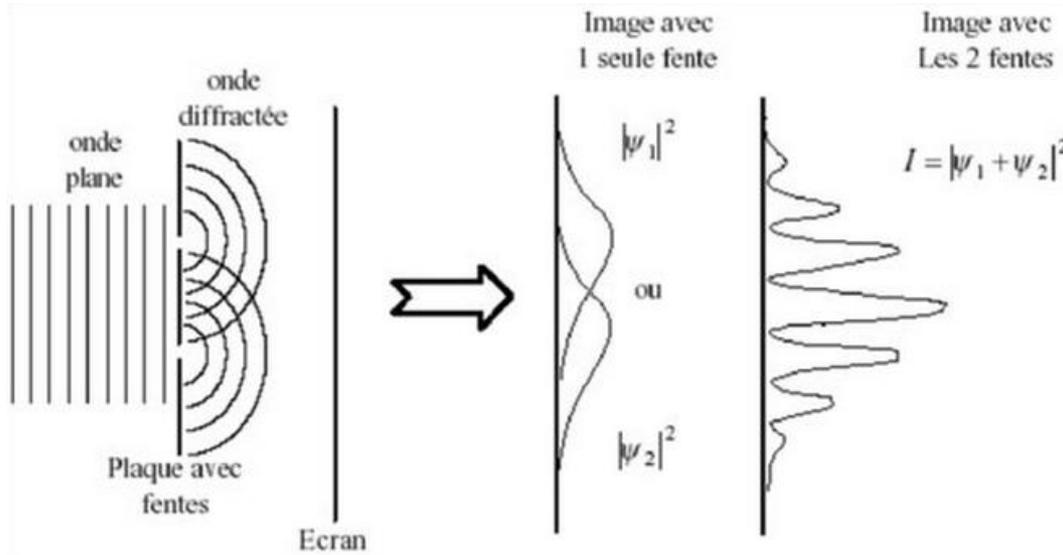
$$mv_n r_n = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$$

# Un exercice sur l'atome de Bohr, absorption des rayons X :



Lien vers l'exercice : [exercice](#)

## 4. L'interprétation de la fonction d'onde $\psi(x)$ , retour sur le phénomène d'interférences :



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

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, entre  $x$  et  $x + dx$ , est donnée par :

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

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

« *La description complète de l'état d'une particule de masse  $m$  dans l'espace à l'instant  $t$  se fait au moyen d'une fonction d'onde.* »

Non seulement Dieu joue  
aux dés mais il les jette parfois  
là où on ne peut les voir.

Stephen Hawking

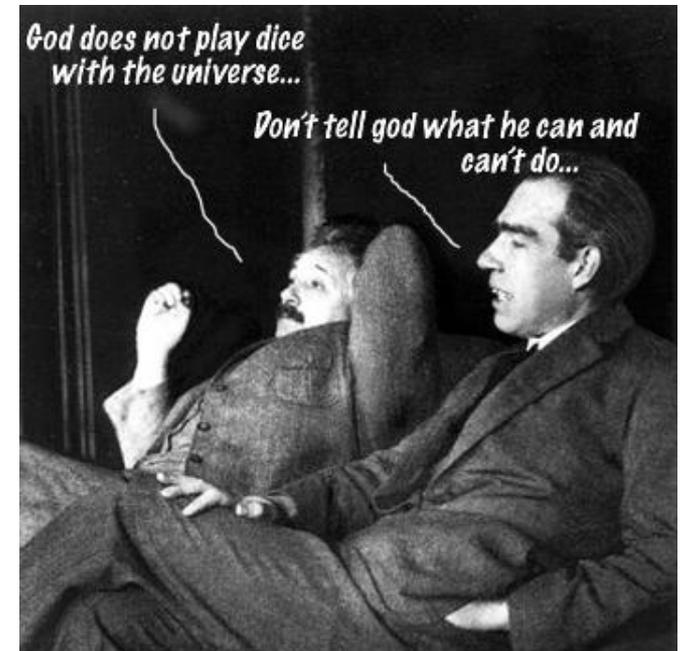
[www.citation-celebre.com](http://www.citation-celebre.com)

La fonction d'onde contient toute l'information disponible :  
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.

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.

Einstein s'opposait à ce rôle central de l'aléatoire au  
sein de la mécanique quantique :

« *Dieu ne joue pas aux dés !* »

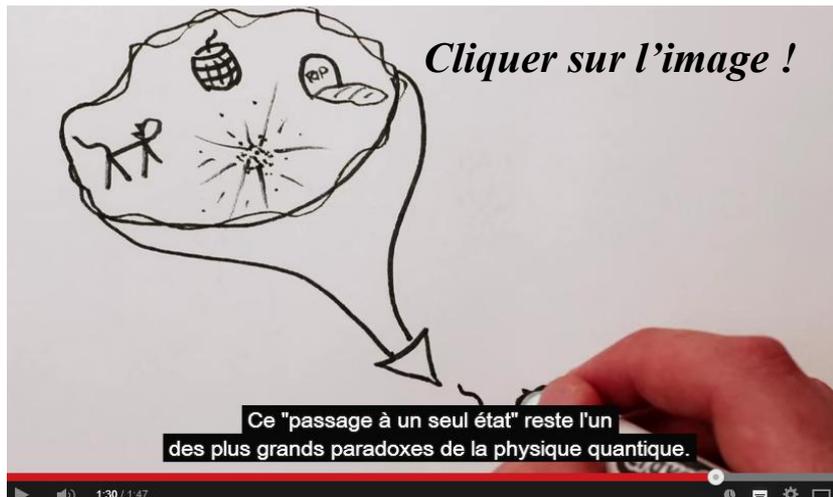


## Le principe de superposition :

- On ne peut connaître l'état d'un système quantique avant de l'avoir mesuré.
- On fait l'hypothèse que tous les états compatibles avec les conditions physiques coexistent avant la mesure.
- Toute composition linéaire des solutions est solution : tous les états coexistent.

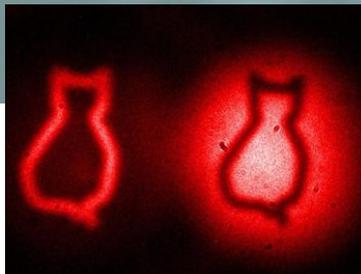
*C'est le principe de superposition.*

*Le paradoxe du chat de Schrödinger*



# *Le paradoxe du chat de Schrödinger vu par Garfield*

- ▶ Dans l'expérience, deux états sont possibles
    - ▶ L'iode radioactif n'a pas émis de radiation + la bouteille de poison est intacte + Garfield est vivant
    - ▶ L'iode radioactif s'est désintégré + la bouteille de poison est cassée + Garfield est mort
  - ▶ Un troisième état doit être envisagé : la superposition des deux états ci-dessus
- ➔ Garfield est à la fois MORT et VIVANT !



*Une photo "quantique" du chat de Schrödinger*

## Le principe de complémentarité :

« Il est faux de penser que le but de la physique est de trouver comment est faite la nature.

La physique est seulement concernée par ce que l'on peut dire sur elle. »

*(Niels Bohr)*



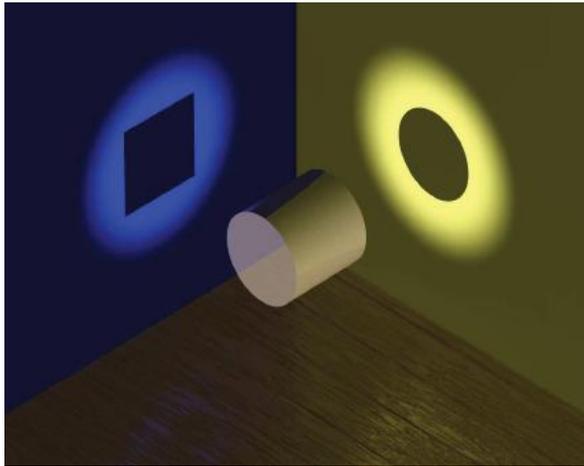
*Lien sur Internet*

## 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.



## 5. Le principe d'indétermination de Heisenberg :

### Inégalité spatiale :

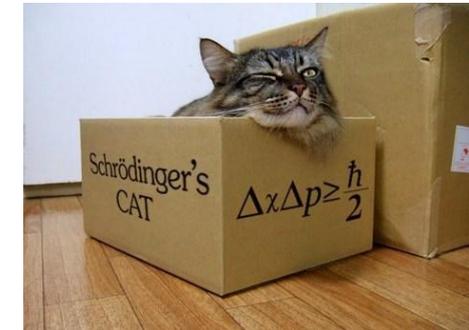
La mesure, à un instant donné quelconque, de la position  $x$  et de la quantité de mouvement (l'impulsion)  $p_x$  sur l'axe (Ox) présentent des indéterminations fondamentales respectives.

Elles sont notées  $\Delta x$  et  $\Delta p_x$  et vérifient l'inégalité spatiale d'Heisenberg :

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar / 2$$

*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.*



***Cliquer sur l'image !***

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

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

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

Le principe d'indétermination d'Heisenberg donne :

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

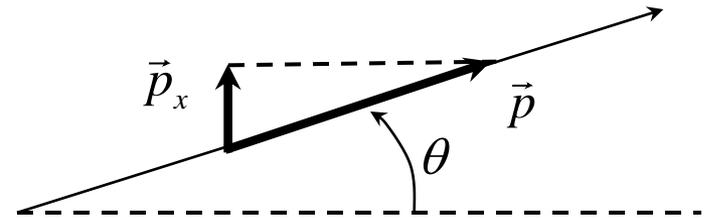
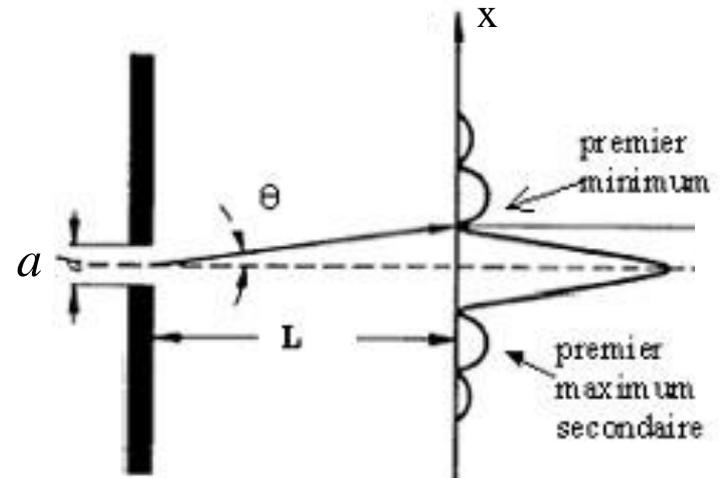
La théorie ondulatoire classique de la diffraction donne :

$$\sin \theta \approx \theta \approx \frac{\lambda_0}{a}$$

On déduit :

$$\Delta p_x \approx p \sin \theta \approx \frac{E}{c} \frac{\lambda_0}{a} \approx \frac{h\nu}{c} \frac{c}{\nu a} \approx \frac{h}{a}$$

En accord, en ordre de grandeur, avec le principe d'indétermination de Heisenberg.



## 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).

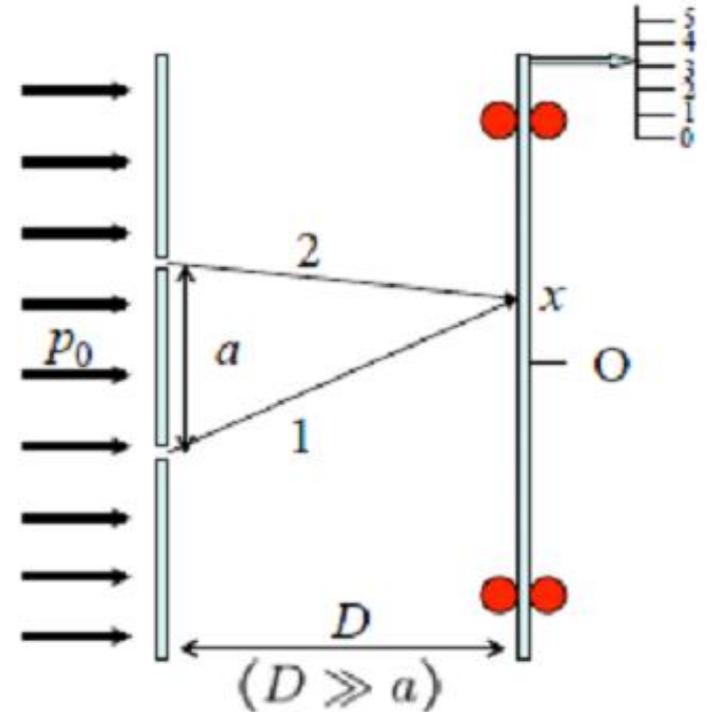
$$\text{Chemins 1 : } p_x^{(1)} = \frac{x + \frac{a}{2}}{D} p_0$$

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

La différence entre les deux quantités de mouvements de recul est :

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

*Comment distinguer entre les deux chemins ?*



Pour distinguer entre les deux événements :

- « La particule passe par la fente 1 »
- « La particule passe par la fente 2 »

Il faut connaître la quantité de mouvement de l'écran avant chaque détection avec une précision :

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

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 vaut  $i_0 = \frac{\lambda_0 D}{a}$  :

$$\Delta x_{\text{écran}} \gg i_0$$

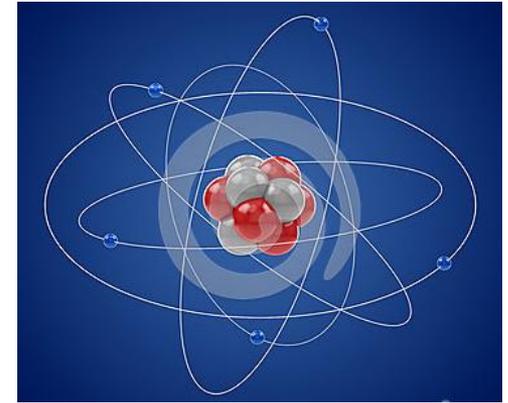
Il y a brouillage des franges ! On peut faire une expérience où on sait par quelle fente passe la particule. On peut faire une expérience où on voit des interférences.

***Mais on ne peut pas faire les deux à la fois !***

## Quelques conséquences : pourquoi un atome est-il stable ?

- Un électron tournant autour d'un noyau est accéléré
- Une charge accélérée rayonne de l'énergie

Dans le modèle planétaire classique, l'électron en rotation autour du noyau finit par tomber sur le noyau.



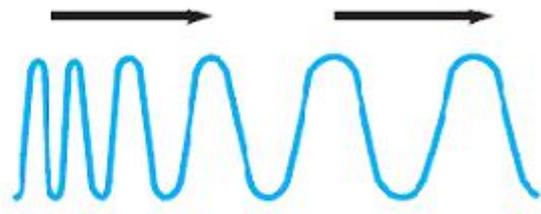
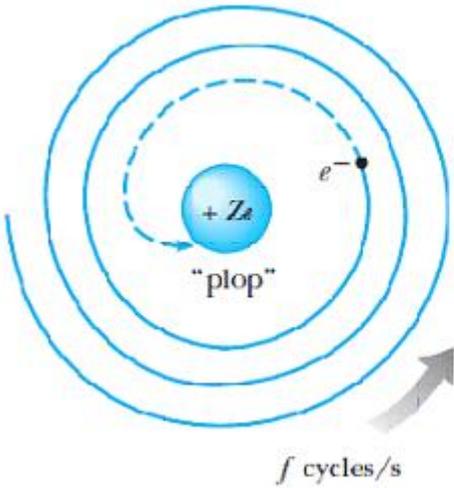
*Quelques rappels pour le modèle de l'atome d'hydrogène :*

$$v = \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{mr}} \quad ; \quad E_m = E_c + E_p = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

La puissance rayonnée est de l'ordre de (formule de Larmor) :  $P_{ray} \approx \left(\frac{e}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{r^2}{c^3}$

La perte relative d'énergie sur un tour est :  $\frac{P_{ray} T}{|E_m|} = \frac{P_{ray} (2\pi r / v)}{|E_m|} \approx 3 \cdot 10^{-5}$

L'électron fait  $3 \cdot 10^{15}$  tours par seconde : en 0,4 ns, il tombe sur le proton !



*Un électron rayonne perd de l'énergie :  
l'électron doit tomber sur le noyau*

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

$$E_p = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\langle r \rangle}$$

Le principe d'indétermination donne :

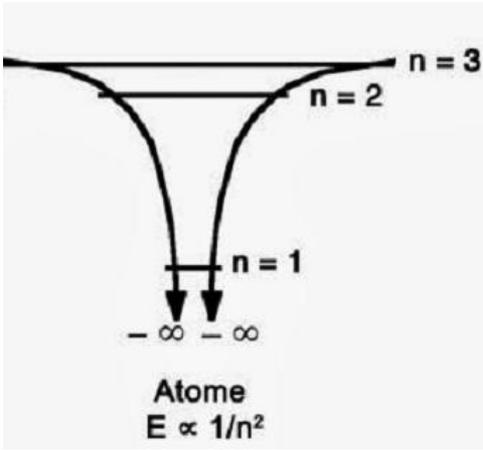
$$\Delta x \Delta p \approx \hbar / 2 \quad \text{soit} \quad \Delta p \approx p_{\min} \approx \hbar / \langle r \rangle \quad \text{et} \quad E_{c,\min} \approx p^2 / 2m \approx \hbar^2 / 2m \langle r \rangle^2$$

L'énergie totale est alors :

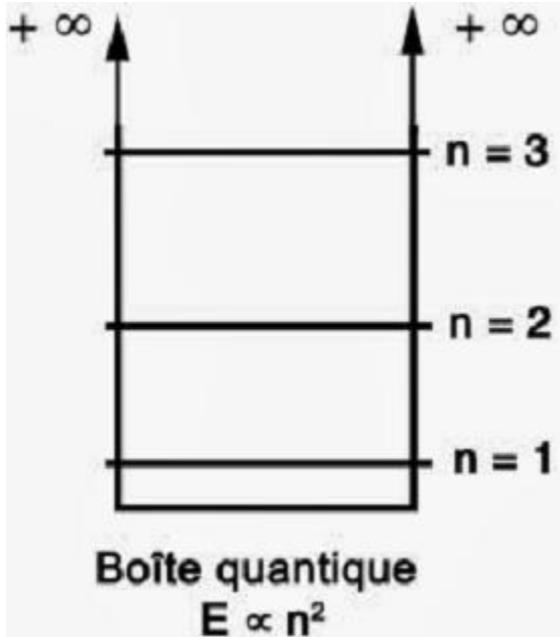
$$E = E_c + E_p = \frac{\hbar^2}{2m \langle r \rangle^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\langle r \rangle}$$

Elle est minimale pour :

$$\langle r \rangle = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / me^2 \approx 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad \text{et} \quad E_{\min} \approx -\frac{m}{2\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = -13,6 \text{ eV} !!$$



# Quelques conséquences : énergie minimale d'une particule dans un puits de potentiel infini



On note  $L$  la largeur du puits de potentiel infini.

Le principe d'indétermination s'écrit :

$$\Delta x \Delta p \approx \hbar / 2$$

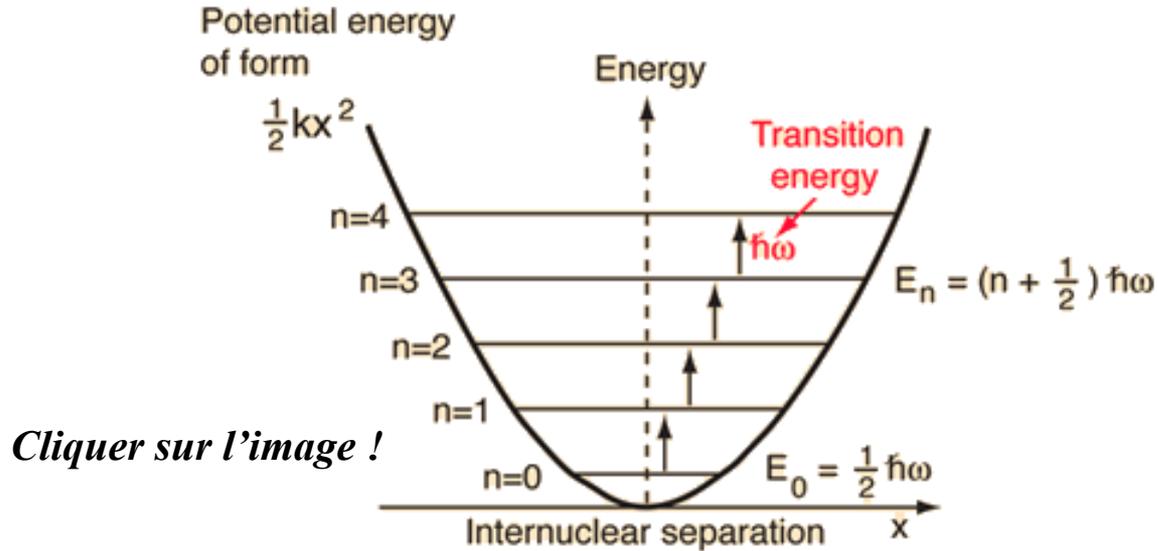
On choisit :

$$(\Delta x)_{max} \approx L / 2 \quad d'o\grave{u} \quad (\Delta p)_{min} \approx \frac{\hbar}{L}$$

L'énergie minimale  $E_1$  s'en déduit :

$$E_1 = \frac{p^2}{2m} \approx \frac{(\Delta p)_{min}^2}{2m} \quad \text{soit} \quad \boxed{E_1 \approx \frac{\hbar^2}{2mL^2}}$$

# Quelques conséquences : énergie minimale d'un oscillateur harmonique



Énergie totale :

$$E = \frac{1}{2} kx^2 + \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2} k \langle x \rangle^2 + \frac{1}{8m} \frac{\hbar^2}{\langle x \rangle^2}$$

Elle est minimale pour :

$$\langle x \rangle^4 = \frac{\hbar^2}{4km} \quad \text{et} \quad E_{\min} \approx \frac{1}{2} \hbar \omega \quad \left( \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \right)$$

## Inégalité temporelle de Heisenberg :

$\Delta E$  est l'indétermination sur la mesure de l'énergie et  $\Delta t$  la durée de la mesure de l'énergie.

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

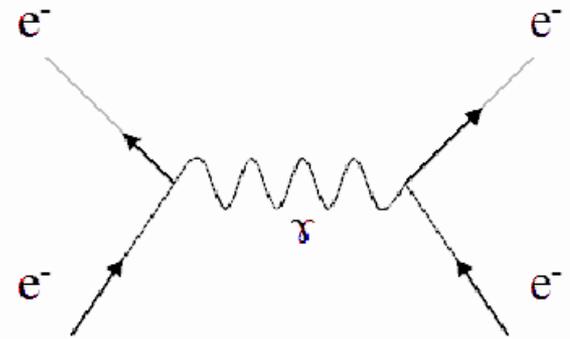
Si l'interaction était de durée nulle, alors  $\Delta E$  serait infinie et l'énergie de la particule serait par conséquent indéterminée.

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  $\Delta t \approx \hbar / \Delta E$ .

On peut alors, 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 :

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



*Diagramme de Feynman d'une interaction entre deux électrons : les traits obliques symbolisent les électrons en mouvement et le trait ondulé représente le photon virtuel échangé.*

## Conclusion sur le principe d'indétermination de Heisenberg :

L'expérimentateur fait partie de l'expérience.

L'expérimentateur interagit avec la nature : on ne peut jamais observer comment la nature est "vraiment".

*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 de la MQ.*

*Une conférence de S Haroche (Prix Nobel en 2012) sur la MQ (cliquer sur l'image) :*



## II. L'équation de Schrödinger



# 1. Cas d'une particule libre :

## Obtention de l'équation de Schrödinger

La fonction d'onde pour une particule libre est (onde de matière plane) :

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} = Ae^{-i(\omega t - kx)}$$

*Attention à la convention de la mécanique quantique !*

Avec :

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{(h/p)} = \frac{p}{\hbar} \quad \text{et} \quad \omega = 2\pi\nu = 2\pi \frac{E}{h} = \frac{E}{\hbar}$$

Il vient :

$$\psi(x, t) = Ae^{i(px - Et)/\hbar}$$

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 :

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

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

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

D'où :

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

*C'est l'équation de Schrödinger pour une particule libre.*

# Physique d'une particule ponctuelle libre

	Mécanique classique	Mécanique quantique
caractéristiques intrinsèques	masse $m$ charge $q$	masse $m$ charge $q$
Etat de la particule	position $\vec{r}(t)$ impulsion $\vec{p}(t)$	fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$
Equation du mouvement	$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\vec{p}}{m}$ $\frac{d\vec{p}}{dt} = 0$	$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi$
Type de connaissance	déterministe $\vec{r}, \vec{p}$	aléatoire $d^3P =  \psi(\vec{r}, t) ^2 d^3r$

## Paquet d'ondes associé à une particule libre :

La relation de dispersion pour une particule libre est :

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} \text{ solution de } i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2}$$

Donc :

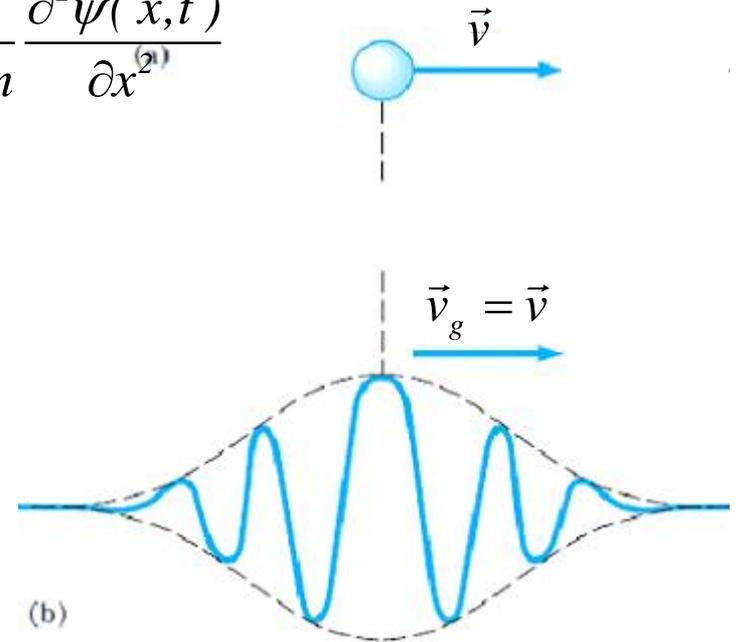
$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

La vitesse de phase est :

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$$

La vitesse de groupe est :

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = v_{\text{particule}} = v$$



(a) : particule de masse  $m$  et de vitesse  $v_0$

(b) : superposition d'ondes de matière dont les longueurs d'onde sont proches et centrées sur  $\lambda_0 = h / mv_0$

*La vitesse de déplacement du quanton s'identifie à la vitesse de groupe du paquet d'ondes.*

## 2. Cas d'une particule soumise à un « potentiel » $V(\mathbf{x})$ :

### Obtention de l'équation de Schrödinger :

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 :

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

*C'est l'équation de Schrödinger pour une particule soumise au potentiel  $V(x)$ .*

## Étude des états stationnaires :

On cherche des solutions à variables séparées (appelées « *états stationnaires* ») :

$$\psi(x, t) = \varphi(x) f(t)$$

L'équation de Schrödinger est vérifiée :

$$i\hbar\varphi(x)\frac{df(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d\varphi^2(x)}{dx^2}f(t) + V(x)\varphi(x)f(t)$$

Soit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi(x)}\frac{d\varphi^2(x)}{dx^2} + V(x) = i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{df(t)}{dt} = \text{cste} = C$$

L'équation différentielle temporelle donne :

$$\frac{df(t)}{dt} = -i\frac{C}{\hbar}f(t) \quad \text{d'où} \quad f(t) = e^{-i\frac{C}{\hbar}t} = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

***L'énergie de la particule est donc une constante du mouvement : les états stationnaires sont des états d'énergie constante.***

L'équation différentielle spatiale donne :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi(x)} \frac{d\varphi^2(x)}{dx^2} + V(x) = E$$

On obtient l'équation de Schrödinger pour la partie spatiale de la fonction d'onde d'un état stationnaire (ou équation de Schrödinger pour les états stationnaires) :

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

La densité de probabilité est indépendante du temps :

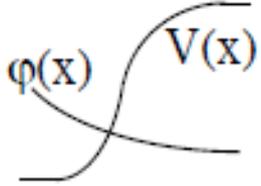
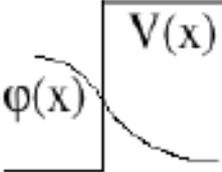
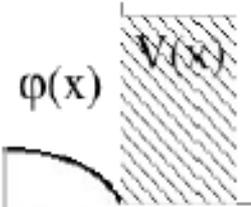
$$\boxed{\frac{dP}{dx} = |\psi(x,t)|^2 = \left| e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \varphi(x) \right|^2 = |\varphi(x)|^2}$$

A 3 dimensions, on généralise :

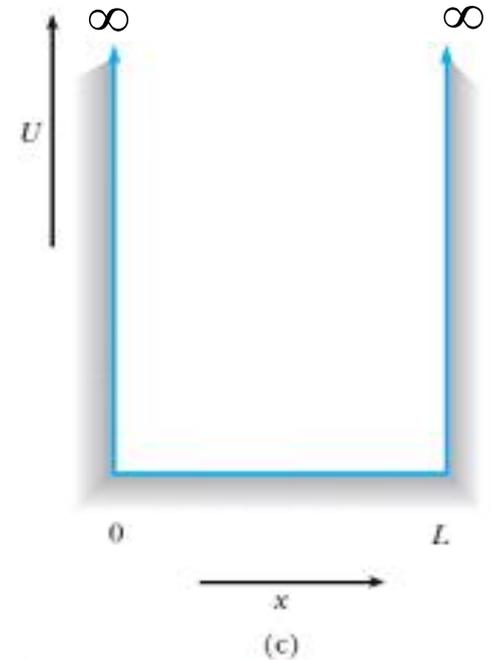
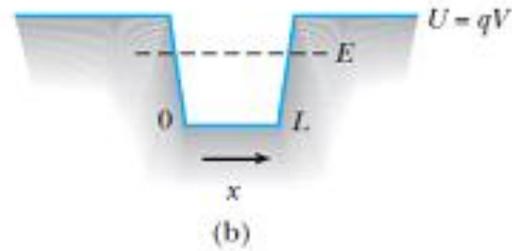
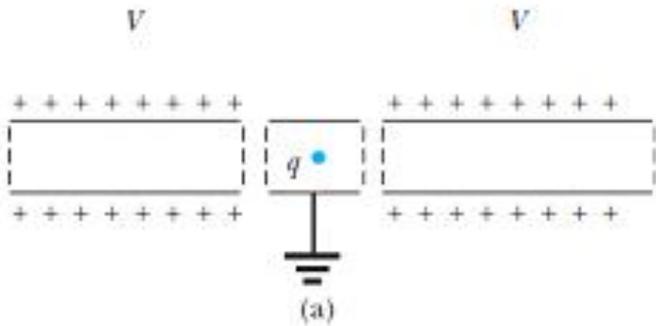
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\varphi(x,y,z) + V(x,y,z)\varphi(x,y,z) = E\varphi(x,y,z)$$

# Propriétés mathématiques de la fonction d'onde :

## Conditions de continuité

Potentiel $V(x)$		Fonction d'onde $\varphi(x)$
continu, borné (cas "réel")		bornée, continue, 2 fois dérivable
discontinu, borné ("marche")		bornée, continue, 1 fois dérivable ( $\varphi''(x)$ est discontinue)
discontinu, non borné ("mur")		bornée, continue, non dérivable ( $\varphi'(x)$ est discontinue)

# Une 1<sup>ère</sup> application, cas d'un puits de potentiel rectangulaire infini :



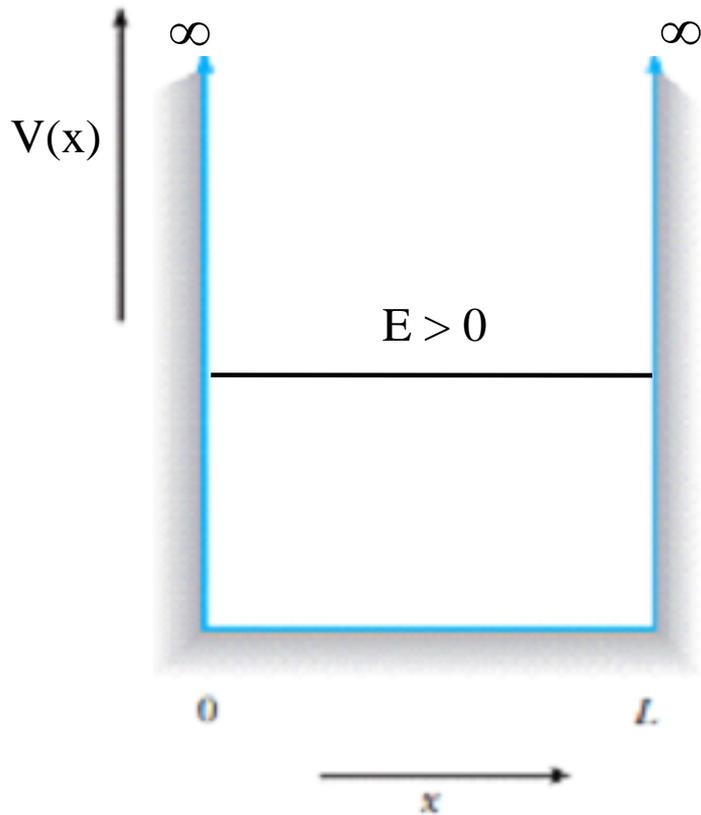
**Cliquer sur l'image !**

**QUANTIFICATION**

▶ À chaque forme correspond une énergie. L'énergie de l'objet apparaît par paliers discontinus : elle est quantifiée.

The image shows a 3D visualization of a potential well. The vertical axis is labeled 'ÉNERGIE' (Energy). The energy levels are shown as horizontal lines within the well, illustrating the quantization of energy.

*Lien sur Internet*



L'équation de Schrödinger pour  $0 < x < L$  est :

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

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0$$

L'énergie  $E = p^2 / 2m > 0$  :

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

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

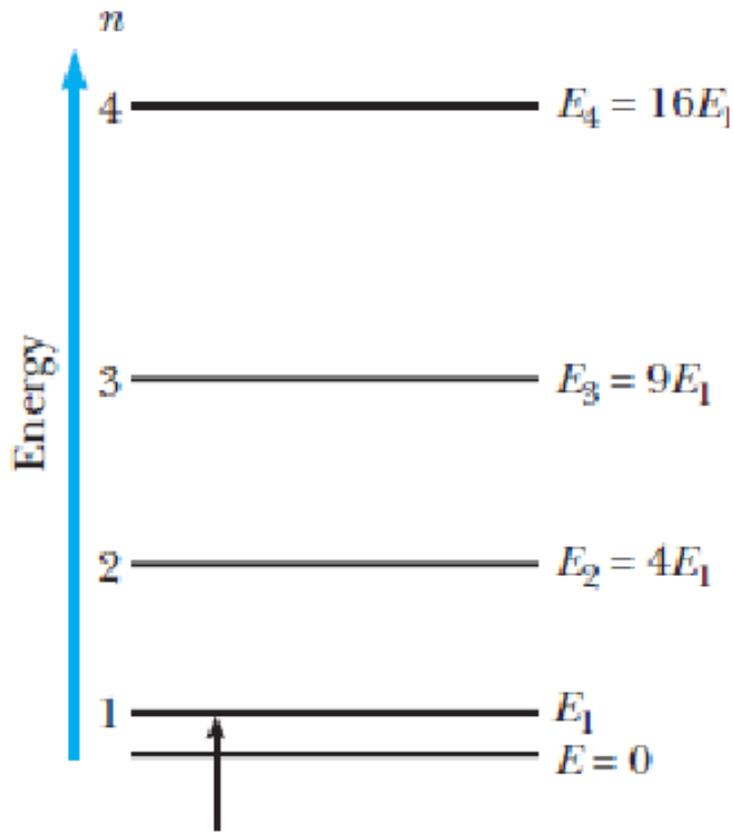
Les conditions aux limites donnent :

$$\varphi(0) = 0 = A$$

$$\text{donc } A = 0$$

$$\varphi(L) = 0 = B \sin(kL)$$

$$\text{donc } \sin(kL) = 0$$



Zero-point energy  $> 0$

Avec  $k = \frac{n\pi}{L}$  :

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

$$E_n = n^2 E_1$$

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

$$\sin(kL) = 0 \quad \text{donne} \quad kL = n\pi$$

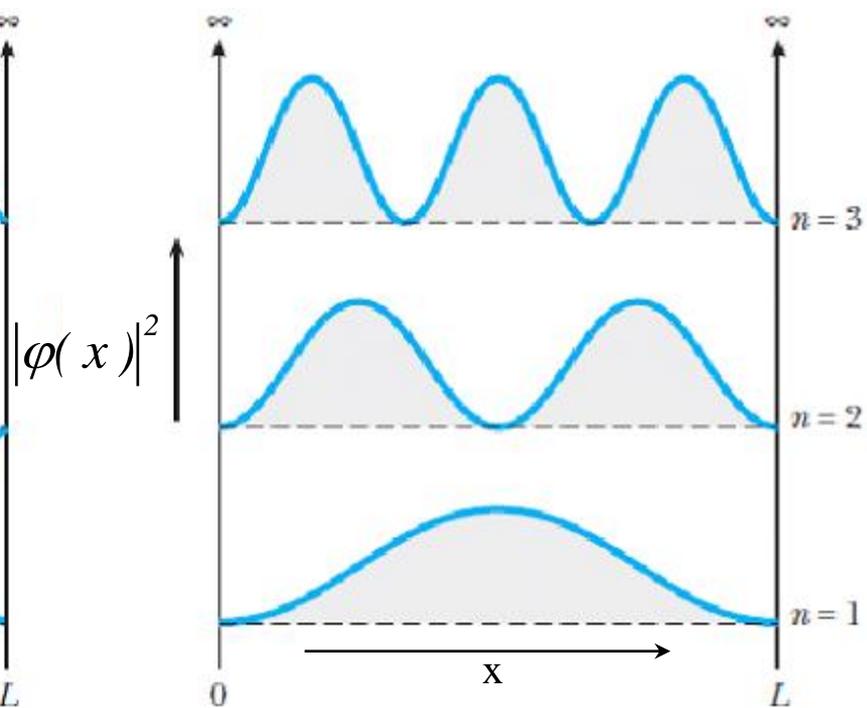
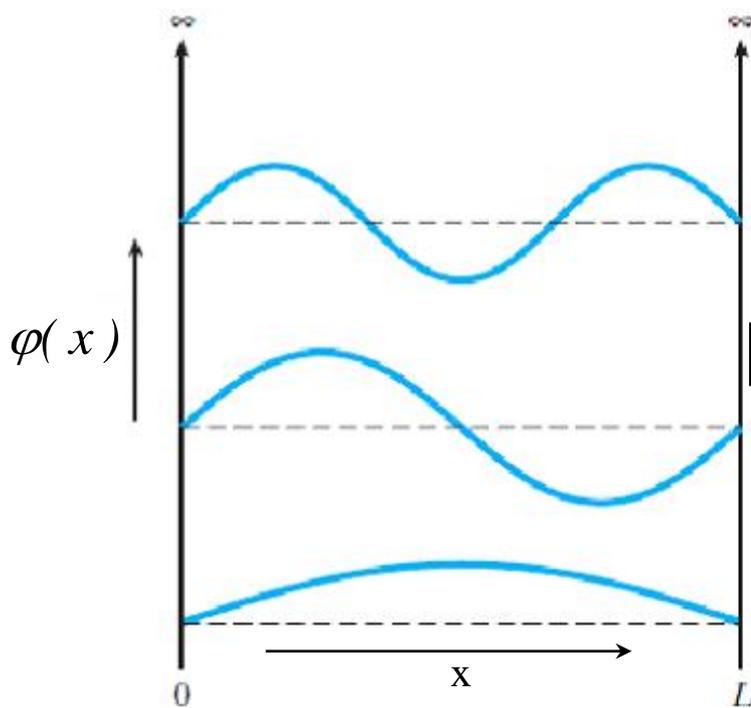
Où  $n$  est entier positif. Avec  $k = 2\pi / \lambda$  :

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

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

*Quantification de l'énergie :*

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{donne} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$



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

avec  $\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1$

**Ordres de grandeur :**

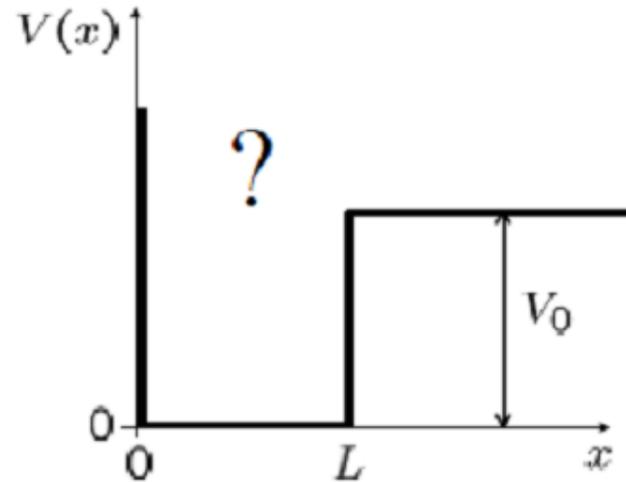
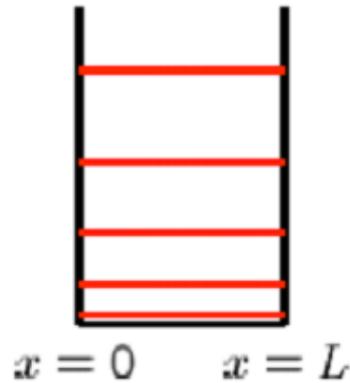
\* Un électron :  $L = 10^{-10} \text{ m} : E_1 \approx 100 \text{ eV}$

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

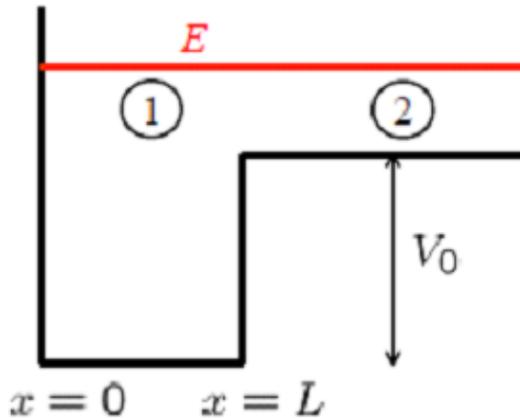
**Un exercice sur le puits de potentiel infini : cliquer [ICI](#)**

## Le puits semi – infini :

énergies:  $n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$



*Recherche des états de diffusion ( $E > V_0$ ) :*

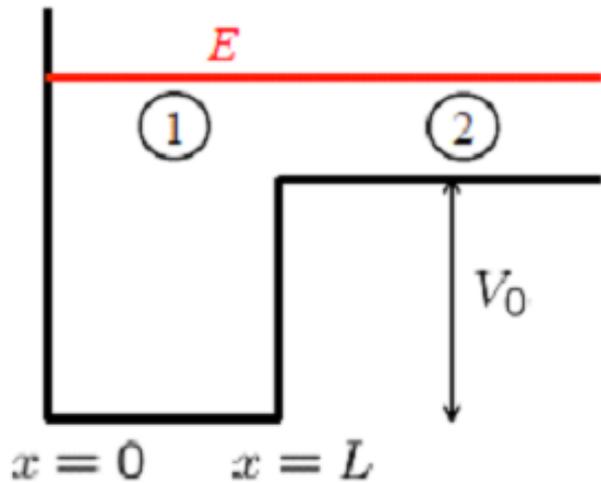


*Région (1) :*

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

*Avec  $\varphi(0) = 0$  :*

$$\varphi(x) = A \sin(kx)$$



Région ( 2 ) :

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + K^2 \varphi(x) = 0 \quad (k = \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar)$$

$$\varphi(x) = B \sin(Kx) + C \cos(Kx)$$

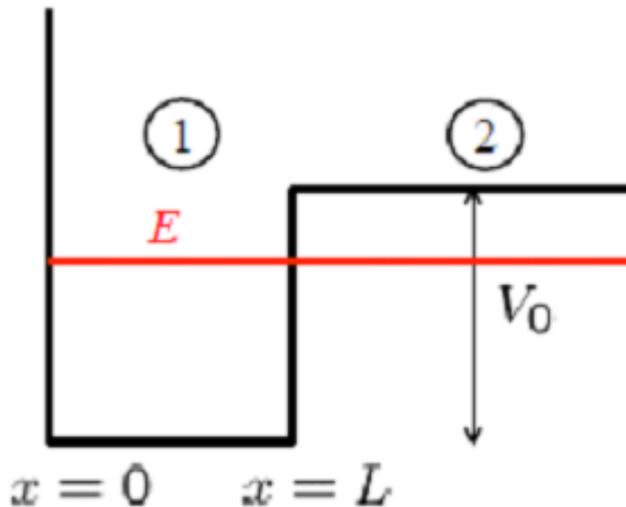
***La fonction d'onde et sa dérivée sont continues en  $x = L$  :***

$$\begin{cases} A \sin(kL) = B \sin(KL) + C \cos(KL) \\ kA \cos(kL) = KB \cos(KL) - KC \sin(KL) \end{cases}$$

C'est un système linéaire de 2 équations à 3 inconnues : pour toute énergie  $E > V_0$ , on trouve une solution (A,B,C) non nulle.

Il y a une infinité d'états de diffusion (*pas de quantification*)

**Recherche des états liés ( $E < V_0$ ) :**



*Région (1) : idem*

$$\varphi(x) = A \sin(kx)$$

*Région (2) :*

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

$$\varphi(x) = Be^{-\alpha x} + C e^{+\alpha x} = Be^{-\alpha x}$$

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

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

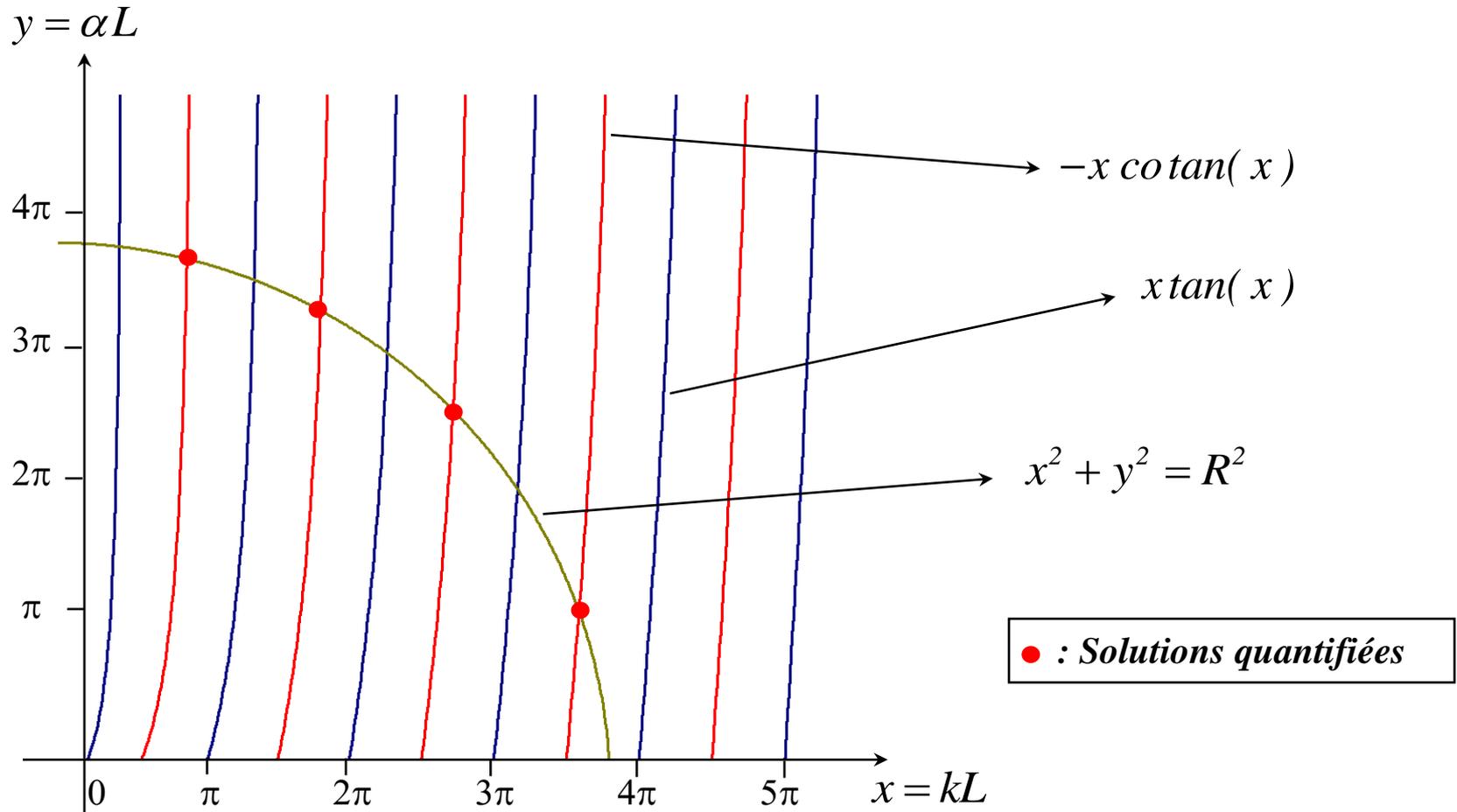
En faisant le rapport membres à membres :

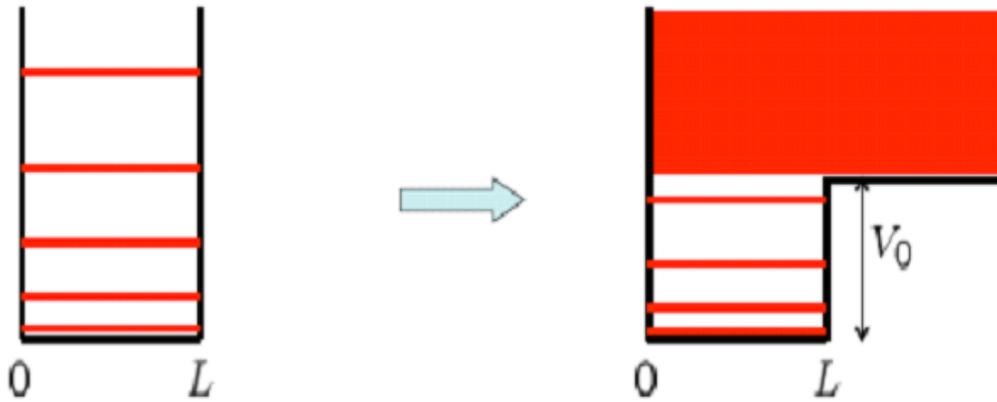
$$\boxed{\alpha = -k \cot an(kL)}$$

*Animations proposées par l'École Polytechnique (Cliquer [ICI](#), puis Lancer la version 2.0)*

**Résolution graphique de l'équation :  $\alpha L = -kL \cot an( kL )$**

On remarque que :  $\alpha^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$  soit  $(\alpha L)^2 + (kL)^2 = \frac{2mL^2V_0}{\hbar^2} = R^2$

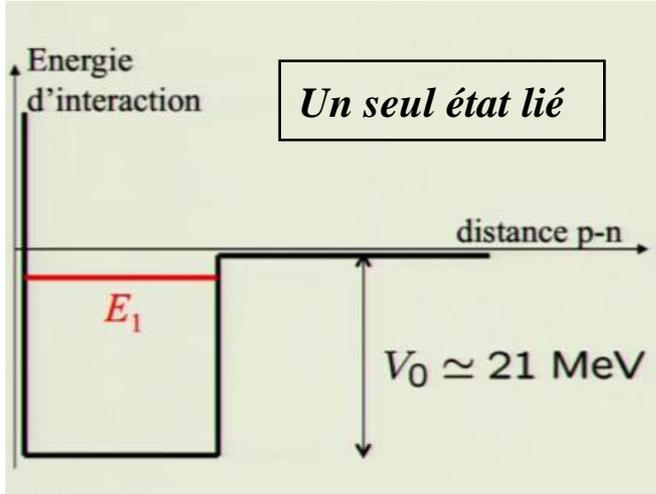




*Continuum d'états libres de diffusion  
pour  $E > V_0$*

*Nombre fini d'états liés tels que  
 $0 < E < V_0$  (quantification)*

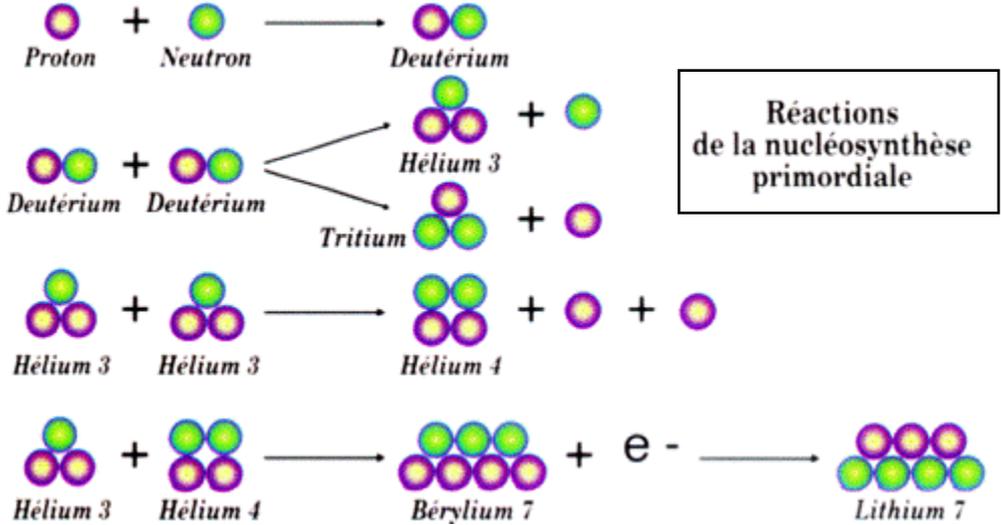
*Modélisation de la force nucléaire entre un proton et un neutron :*



*Un seul état lié*

$$L \approx 2,8 \cdot 10^{-15} \text{ m}$$

$$V_0 - E_1 \approx 2,2 \text{ MeV}$$



*Réactions de la nucléosynthèse primordiale*

## Puits de potentiel de profondeur finie :

(On suppose  $0 < E < U_0$  : états liés)

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 :

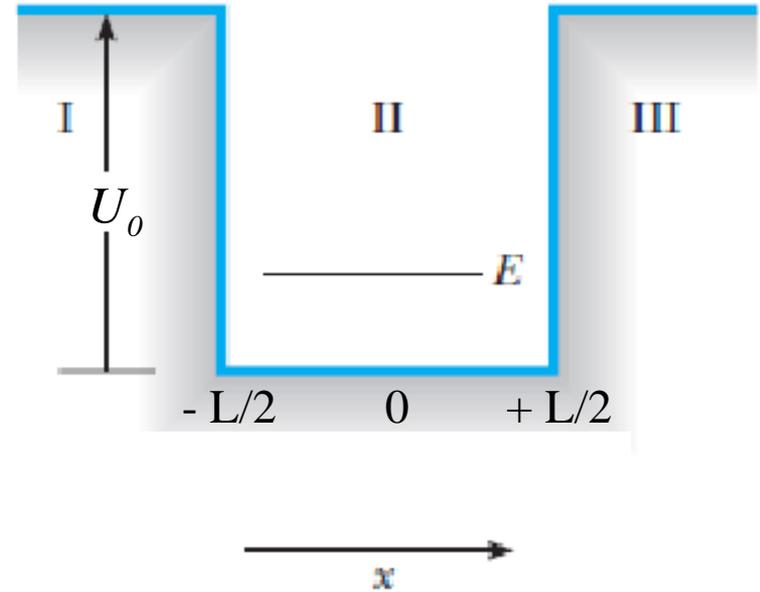
$$\frac{d^2 \varphi_1(x)}{dx^2} - \alpha^2 \varphi_1(x) = 0 \quad \text{avec} \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$

On ne garde que la solution « non explosive » :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{\alpha x}$$

Pour  $x > \frac{L}{2}$  :

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{-\alpha x}$$

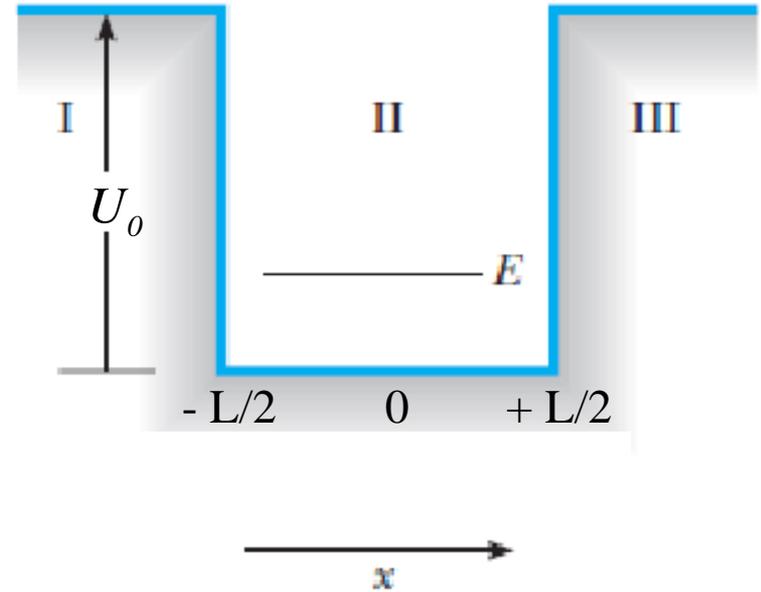


Pour  $-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}$  :

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

Soit :

$$\frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} + k^2 \varphi_2(x) = 0 \quad \text{avec} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$



Les solutions sont de la forme :

$$\varphi_2(x) = A_2 \cos(kx) + B_2 \sin(kx)$$

On cherche, dans la suite, des fonctions d'ondes symétriques (paires) ou antisymétriques (impaires) :

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

## États stationnaires pairs :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{\alpha x} \quad ; \quad \varphi_3(x) = A_1 e^{-\alpha x}$$

$$\varphi_2(x) = A_2 \cos(kx)$$

Continuité de  $\varphi(x)$  et de  $d\varphi / dx$  en  $+L/2$  par exemple :

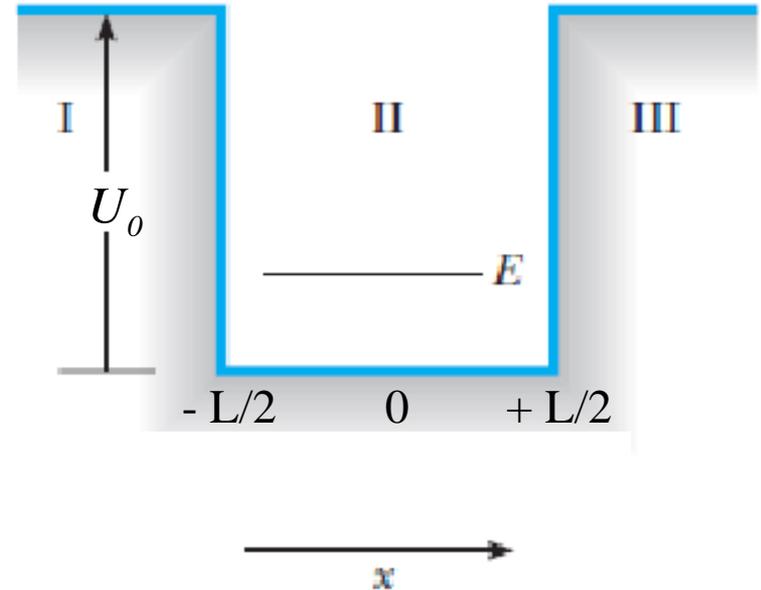
$$\begin{cases} A_1 e^{-\alpha L/2} = A_2 \cos(kL/2) \\ \alpha A_1 e^{-\alpha L/2} = k A_2 \sin(kL/2) \end{cases}$$

Soit le système :

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

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

$$-e^{-\alpha L/2} k \sin(kL/2) + \alpha e^{-\alpha L/2} \cos(kL/2) = 0 \quad \text{soit} \quad \boxed{\alpha = k \tan(kL/2)}$$



**Résolution de l'équation :**  $\alpha = k \tan\left(\frac{kL}{2}\right)$  ou  $\frac{\alpha L}{2} = \frac{kL}{2} \tan\left(\frac{kL}{2}\right)$

On remarque que :

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

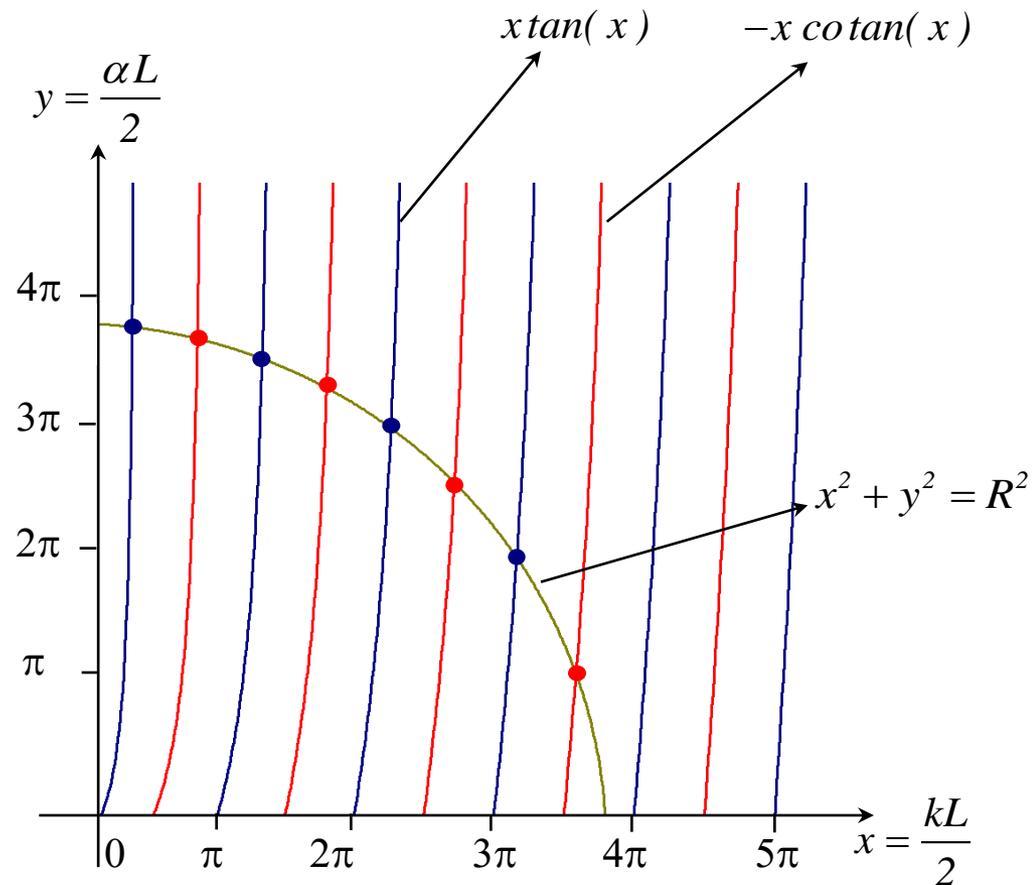
$$\left(\frac{\alpha L}{2}\right)^2 + \left(\frac{kL}{2}\right)^2 = \frac{mL^2U_0}{2\hbar^2} = R^2$$

On pose :

$$y = \frac{\alpha L}{2} \quad \text{et} \quad x = \frac{kL}{2}$$

Alors :

$x^2 + y^2 = R^2 \quad \text{et} \quad y = x \tan(x)$



**Solutions symétriques :** ●

**Solutions antisymétriques :** ●

**Résolution de l'équation (autre méthode) :**  $\alpha = k \tan\left(\frac{kL}{2}\right)$

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 :

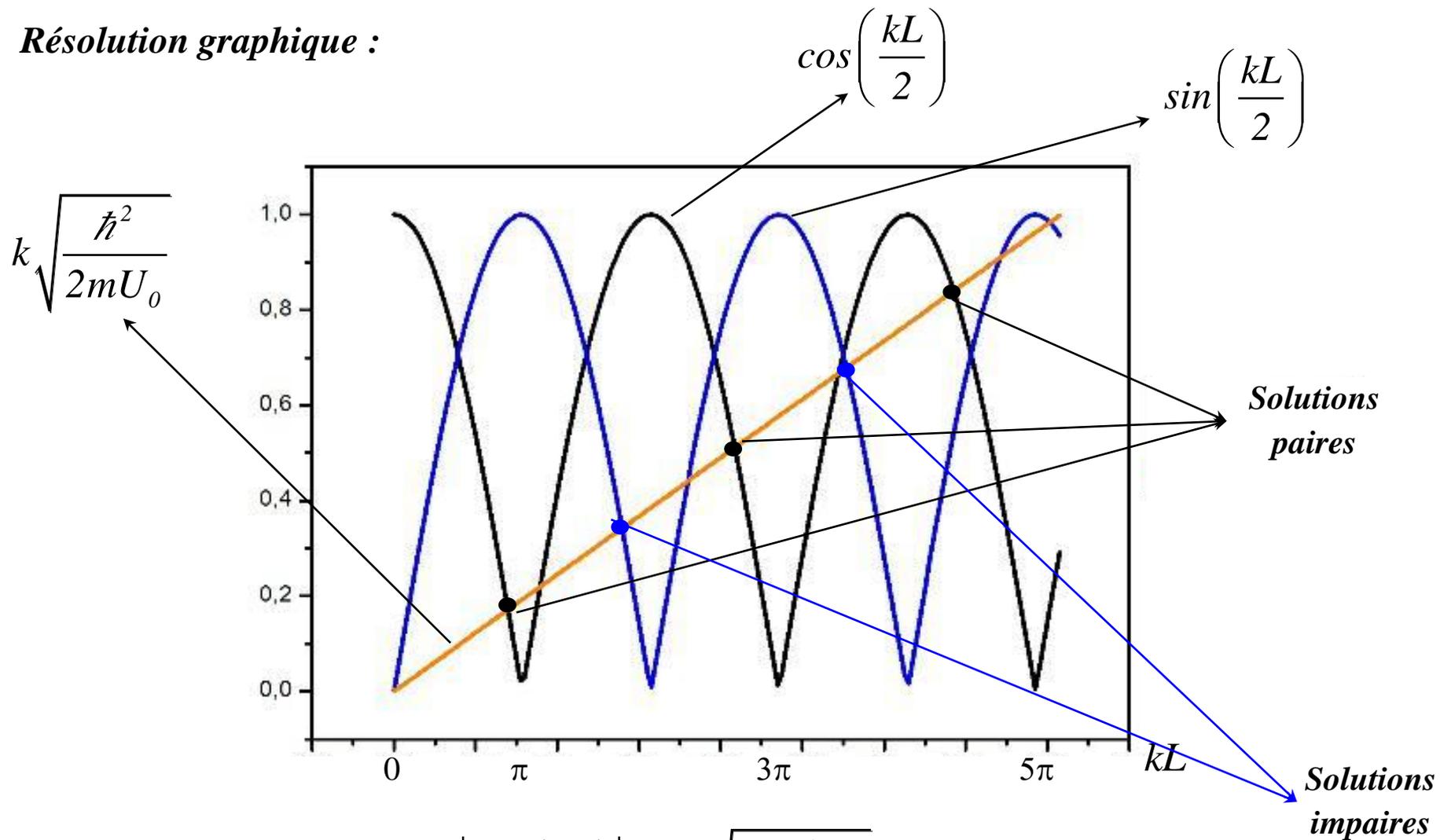
$$\alpha^2 + k^2 = k^2 \left( \tan^2\left(\frac{kL}{2}\right) + 1 \right) = \frac{2mU_0}{\hbar^2}$$

$$k^2 \frac{1}{\cos^2\left(\frac{kL}{2}\right)} = \frac{2mU_0}{\hbar^2}$$

D'où :

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

*Résolution graphique :*



$$\left| \cos\left(\frac{kL}{2}\right) \right| = kL \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mL^2U_0}}$$

## États stationnaires impairs :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{\alpha x} \quad ; \quad \varphi_3(x) = -A_1 e^{-\alpha x}$$

$$\varphi_2(x) = B_2 \sin(kx)$$

Un raisonnement similaire au cas pair conduit à :

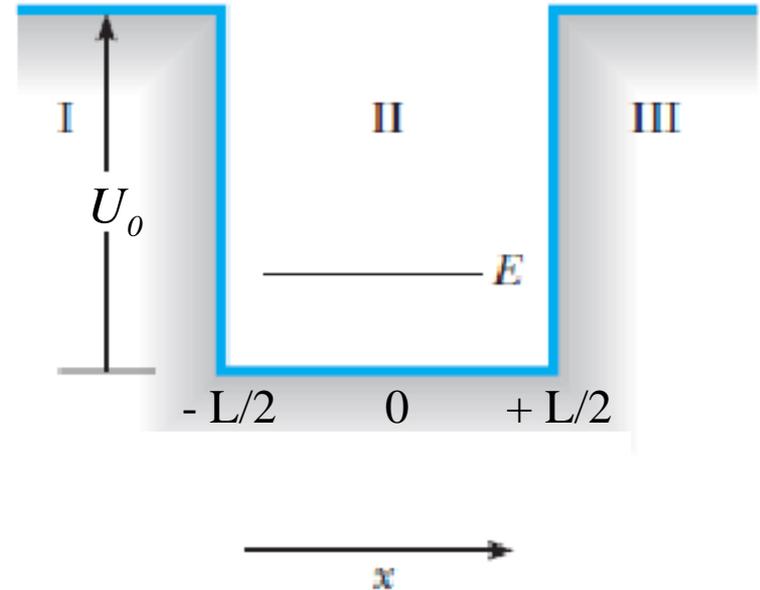
$$\alpha = -k \cotan\left(\frac{kL}{2}\right)$$

$$\cotan\left(\frac{kL}{2}\right) < 0 \quad \text{donc} \quad (2n+1)\pi < kL < (2n+2)\pi$$

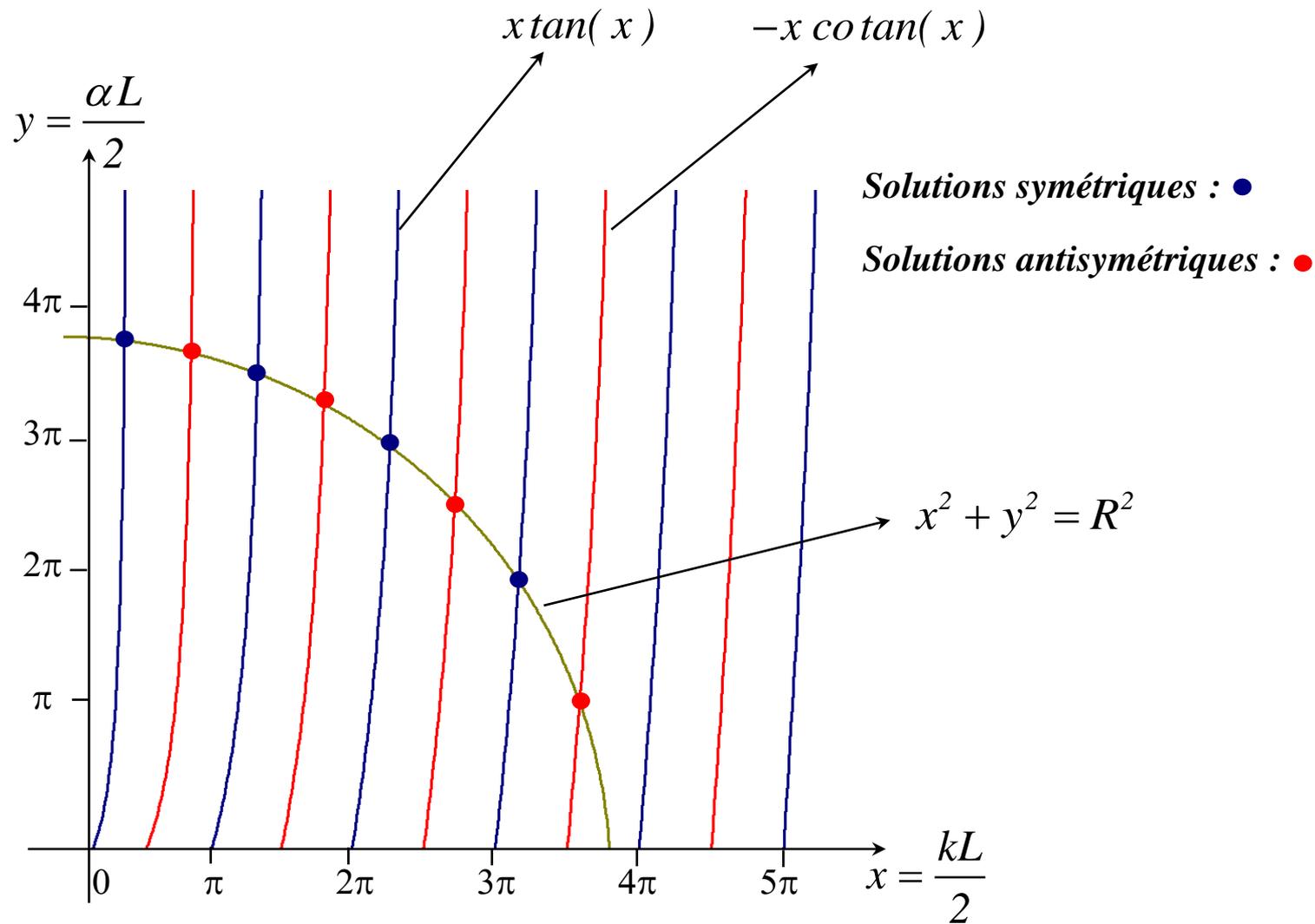
$$\alpha^2 + k^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2} \quad \text{soit} \quad \left(\frac{\alpha L}{2}\right)^2 + \left(\frac{kL}{2}\right)^2 = \frac{mL^2 U_0}{2\hbar^2} = R^2$$

$$\boxed{x^2 + y^2 = R^2 \quad \text{et} \quad y = -x \cotan(x)}$$

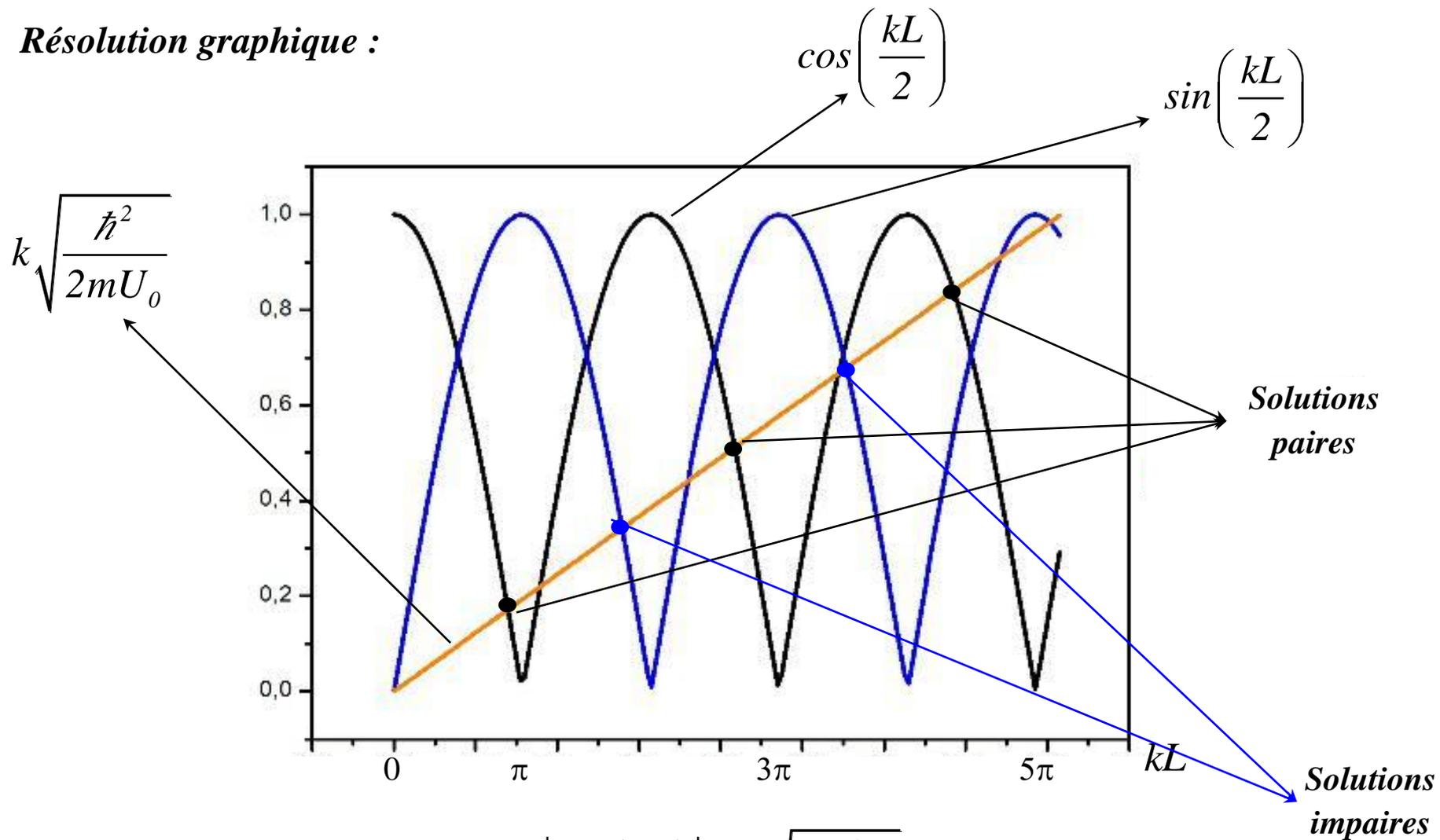
$$\boxed{\left| \sin\left(\frac{kL}{2}\right) \right| = k \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0}}}$$



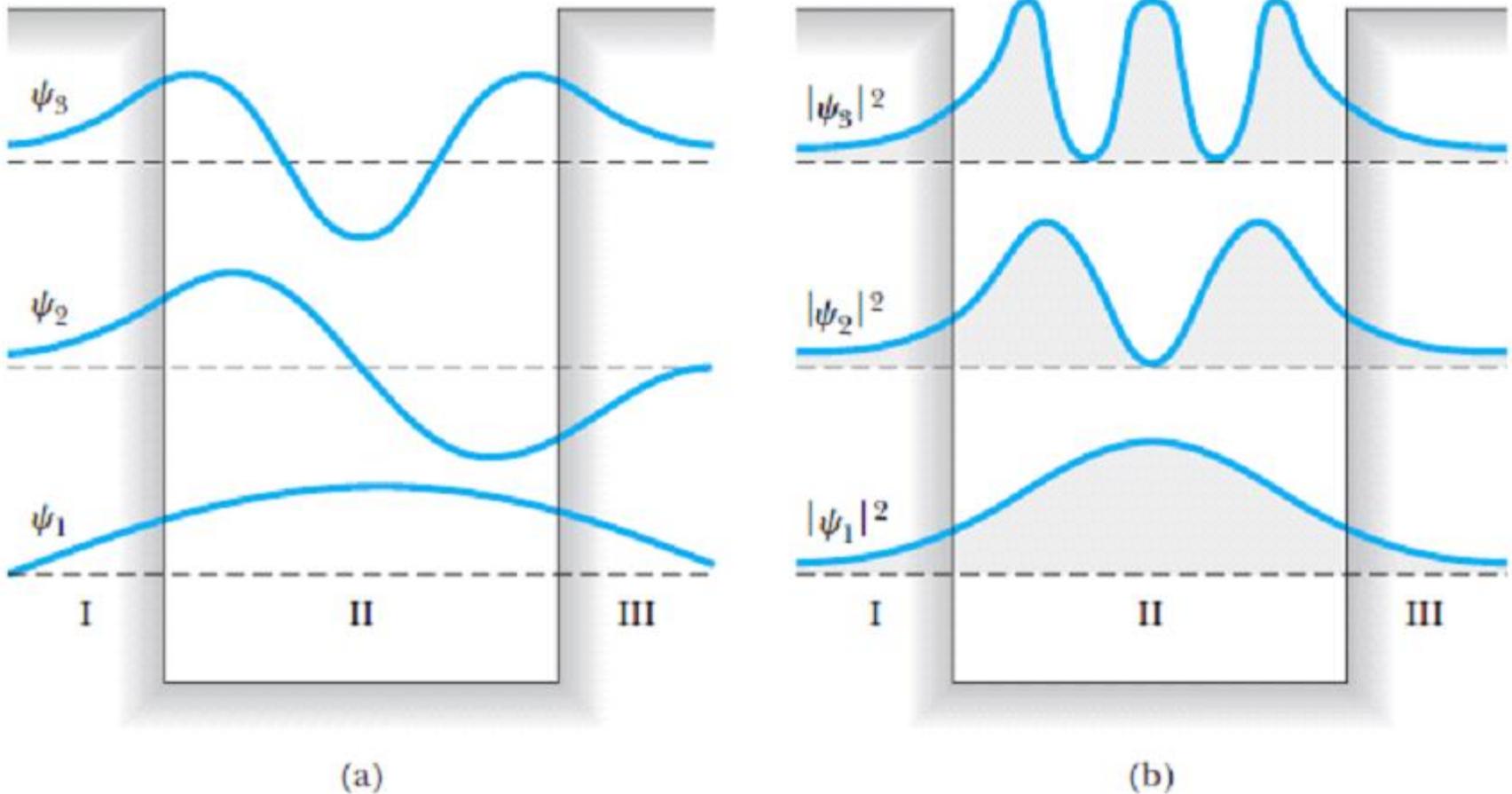
# Résolution graphique :



*Résolution graphique :*



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



*Fonction d'onde et densité de probabilité pour les trois états de plus basse énergie.*

*Un exercice sur le puits de potentiel fini : cliquer [ICI](#)*

## 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 :

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

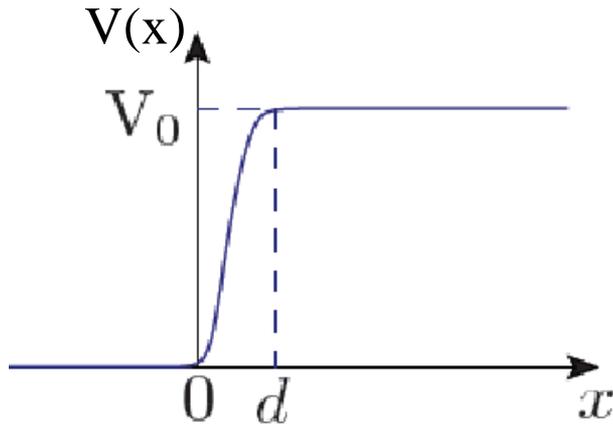
Ces deux fonctions  $\varphi_{sym}(x)$  et  $\varphi_{asym}(x)$  sont solutions de l'équation de Schrödinger (par linéarité) pour la même valeur de l'énergie  $E$ .

Les transparents précédents ont montré que les fonctions d'onde paires et impaires ne correspondaient pas aux mêmes énergies.

### *Conclusion :*

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

## Marche de potentiel :



On choisit un potentiel de la forme (on néglige la « montée » d) :

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

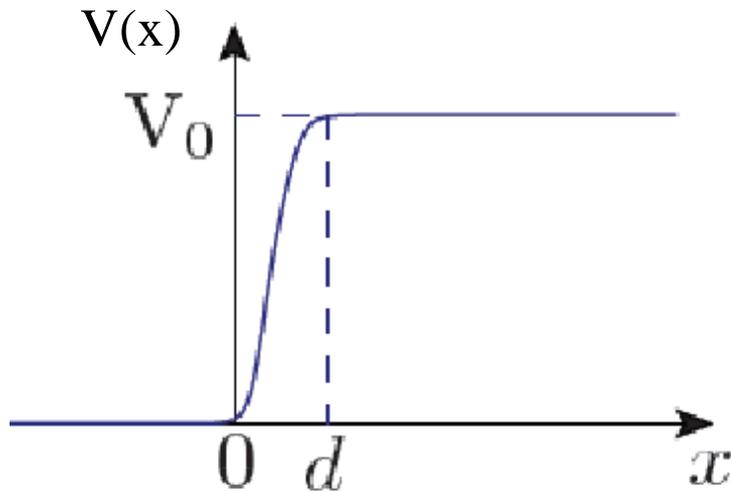
On considère une particule venant de l'infini avec une énergie  $E > V_0$ .

En mécanique classique :

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

### *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



On résout l'équation de Schrödinger :

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

$$\varphi(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \quad \text{avec } k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

*(Ondes incidente et réfléchie)*

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

$$\varphi(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x} = A_2 e^{ik_2 x} \quad \text{avec } k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

*(Onde transmise uniquement, attention à la convention  $\psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$ )*

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

$$A_1 + A_1' = A_2 \quad \text{et} \quad k_1(A_1 - A_1') = k_2 A_2$$

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

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

et

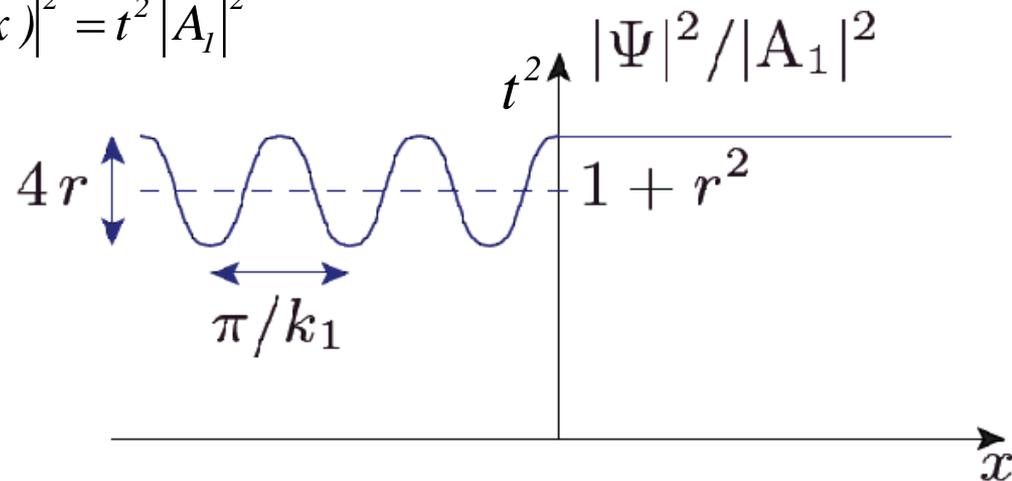
$$t = \frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

**Densités de probabilité :**

Onde de probabilité réfléchiée ( $x < 0$ ) :  $|\varphi(x)|^2 = (1 + r^2 + 2r \cos(2k_1 x)) |A_1|^2$

Onde de probabilité transmise ( $x > 0$ ) :  $|\varphi(x)|^2 = t^2 |A_1|^2$

*Un exercice sur la marche de  
potentiel :  
cliquer [ICI](#)*



## Courant de probabilité :

<i>Cas électrique</i>	<i>Cas quantique</i>
<i>Vitesse de porteur</i> $\vec{v}$	<i>Vitesse du quanton</i> $\vec{p}/m = \hbar \vec{k}/m$
<i>Charge volumique</i> $\rho$	<i>Densité de probabilité</i> $ \Psi ^2$
<i>Densité de courant électrique</i> $\vec{j} = \rho \vec{v}$	<i>Densité de courant de probabilité</i> $\vec{J} =  \Psi ^2 \vec{p}/m$

Densité de courant de probabilité incident :  $\vec{J}_i = J_i \vec{u}_x = \frac{p_i}{m} |A_i|^2 \vec{u}_x = \frac{\hbar k_1}{m} |A_i|^2 \vec{u}_x$

Densité de courant de probabilité réfléchi :  $\vec{J}_r = J_r \vec{u}_x = -\frac{p_r}{m} |A_r|^2 \vec{u}_x = -\frac{\hbar k_1}{m} |rA_i|^2 \vec{u}_x$

Densité de courant de probabilité transmis :  $\vec{J}_t = J_t \vec{u}_x = \frac{p_t}{m} |A_t|^2 \vec{u}_x = \frac{\hbar k_2}{m} |tA_i|^2 \vec{u}_x$

Densité de courant de probabilité incident :  $\vec{J}_i = J_i \vec{u}_x = \frac{p_i}{m} |A_i|^2 \vec{u}_x = \frac{\hbar k_1}{m} |A_i|^2 \vec{u}_x$

Densité de courant de probabilité réfléchi :  $\vec{J}_r = J_r \vec{u}_x = -\frac{p_r}{m} |A_r|^2 \vec{u}_x = -\frac{\hbar k_1}{m} |rA_i|^2 \vec{u}_x$

Densité de courant de probabilité transmis :  $\vec{J}_t = J_t \vec{u}_x = \frac{p_t}{m} |A_t|^2 \vec{u}_x = \frac{\hbar k_2}{m} |tA_i|^2 \vec{u}_x$

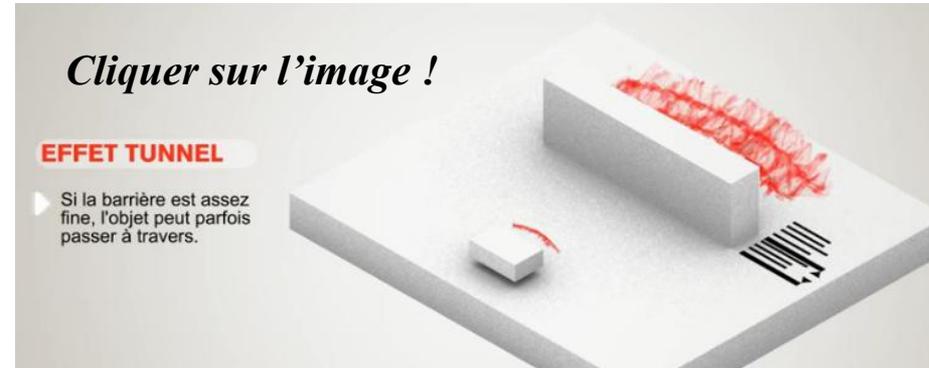
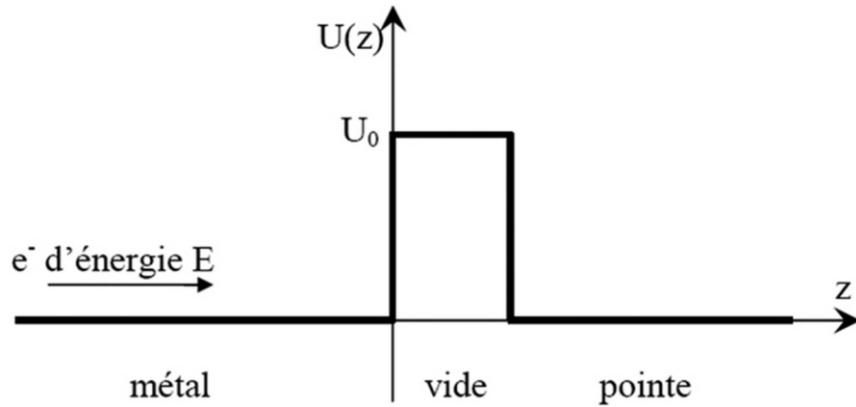
On déduit :

**Coefficients de probabilité de réflexion R :**  $R = \frac{|J_r|}{|J_i|} = r^2 = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$

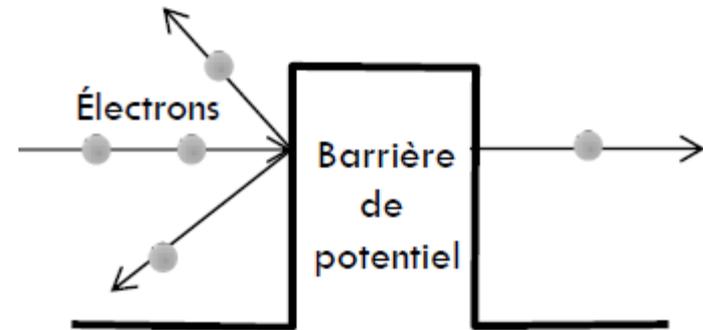
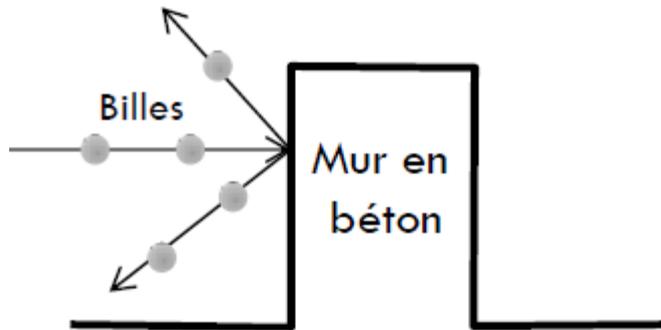
**Coefficients de probabilité de transmission T :**  $T = \frac{|J_t|}{|J_i|} = \frac{k_2}{k_1} t^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$

Avec :  $\boxed{R + T = 1}$  (Un quanton est soit réfléchi soit transmis)

# Barrière de potentiel, « l'effet tunnel » :

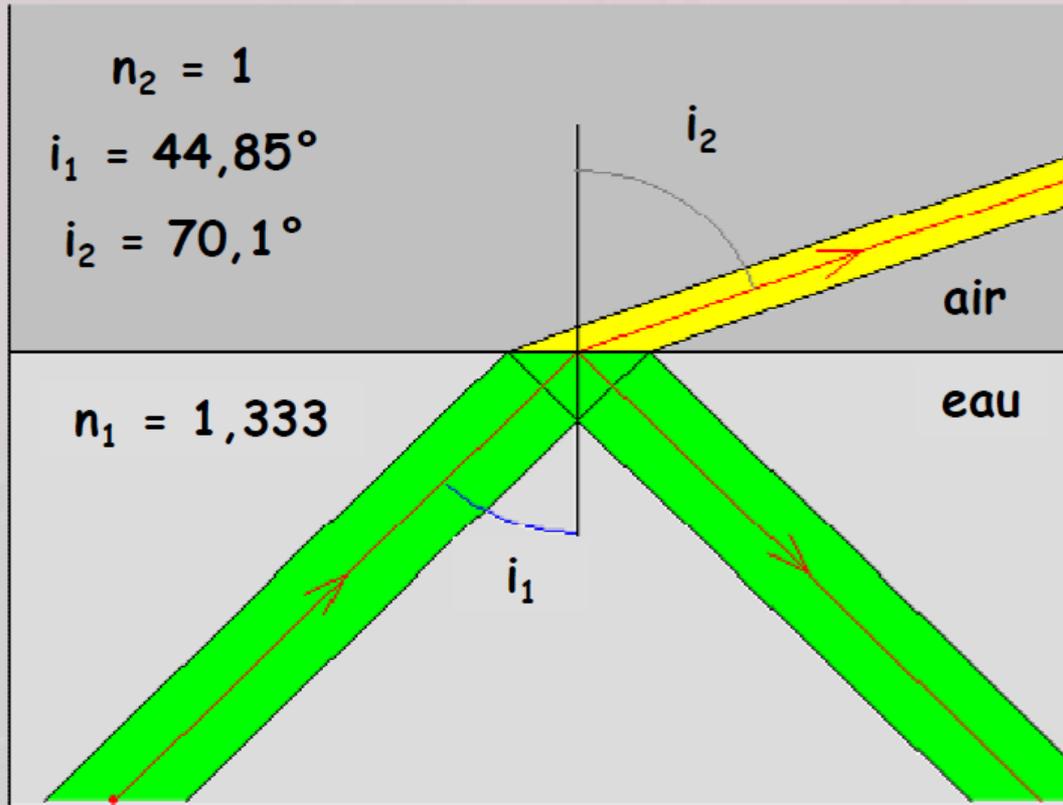


*Lien sur Internet*



# « L'effet tunnel » en optique : la réflexion totale frustrée

Le phénomène de réflexion totale : (pour  $n_1 > n_2$ )



Si  $i_1 > i_L$  : réflexion totale ( $i_2$  n'existe pas)

## Simulation Rousseau

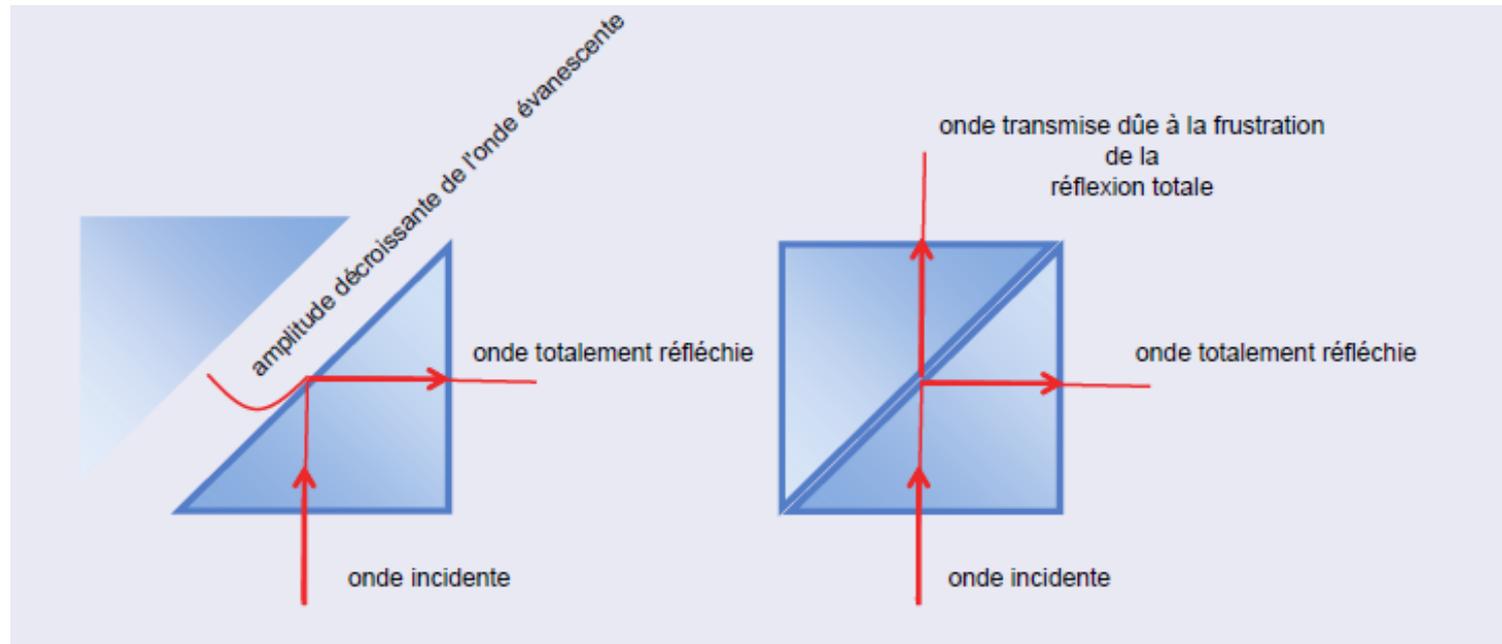
$$\sin i_2 = \frac{n_1}{n_2} \sin i_1$$

$\sin i_2 \leq 1$  implique :

$$i_1 \leq i_L \text{ avec :}$$

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

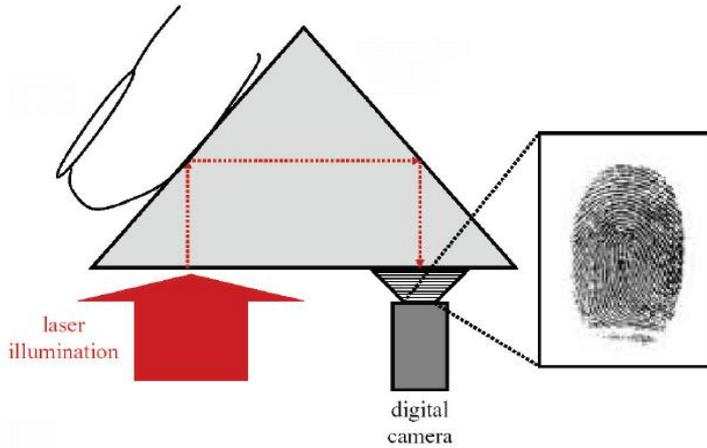




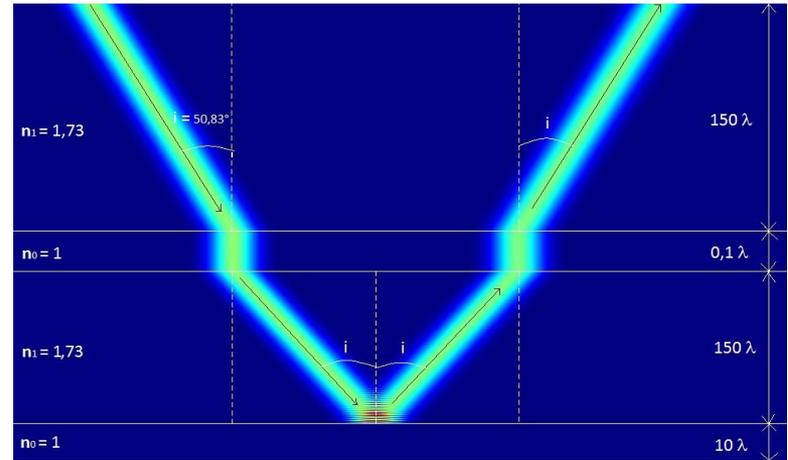
Dans le cas de gauche, l'onde est totalement réfléchie car l'onde évanescente est complètement absorbée avant d'atteindre le second prisme.

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).

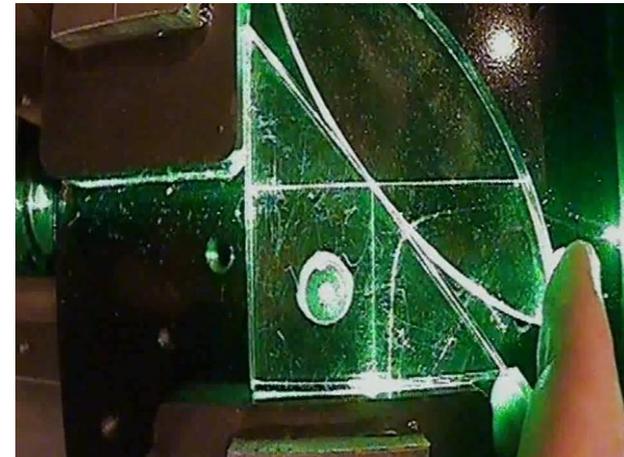
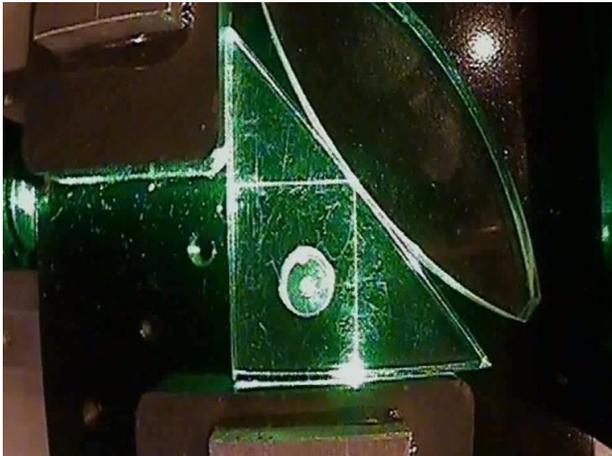
***La réflexion totale est ainsi frustrée car une onde peut sortir du 1<sup>er</sup> prisme sans être réfléchie.***



*Principe d'un capteur d'empreintes digitales.*

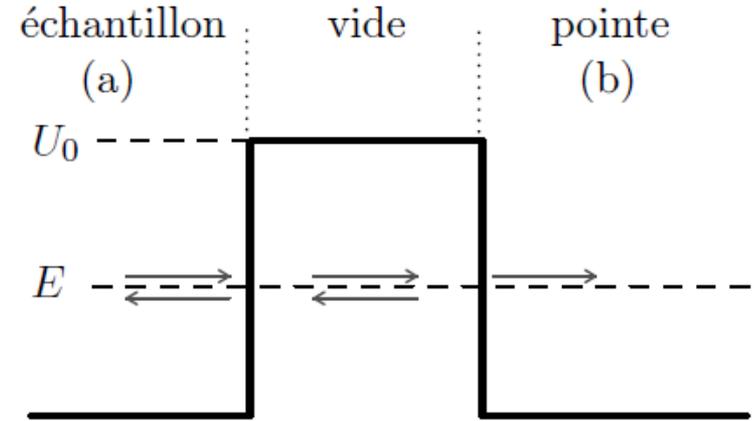
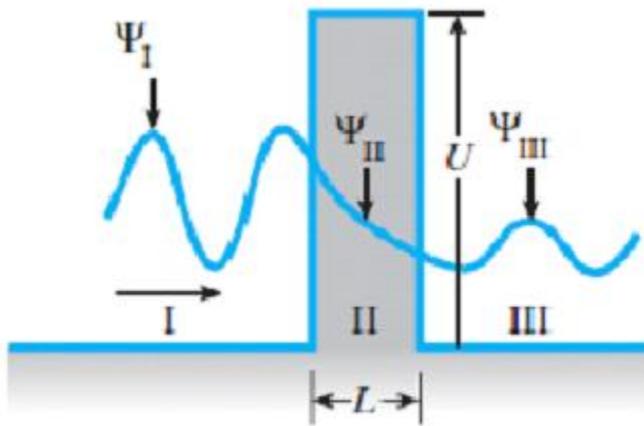


*Simulation informatique de la réflexion totale frustrée.*



*Voir vidéo du cours de l'école Polytechnique (Cliquer [ICI](#) (temps : 53'25''))*

## Barrière de potentiel, « l'effet tunnel » :



La solution de l'équation de Schrödinger se met sous la forme :

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (x < 0) \\ Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x} & (0 < x < L) \\ Fe^{ikx} & (x > L) \end{cases}$$

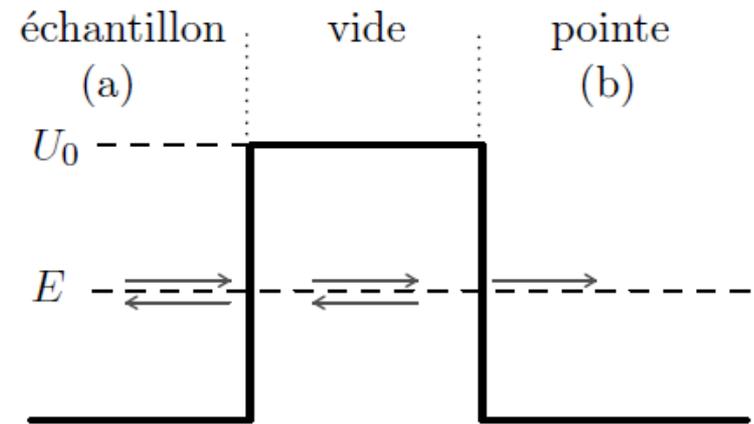
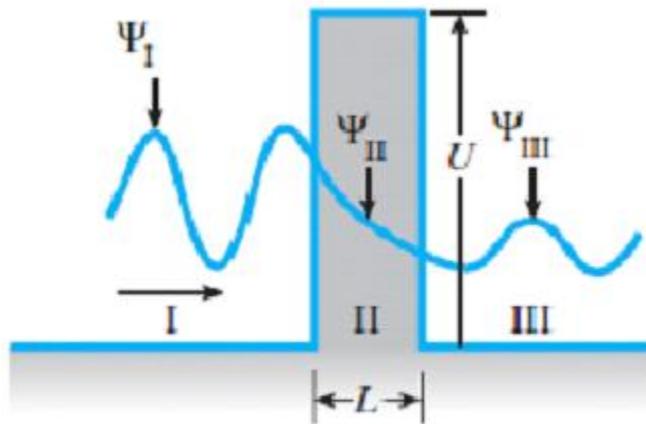
*Ondes de probabilité incidente et réfléchie*

*Onde transmise qui se propage dans le sens  $> 0$   
(attention à la convention en  $\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$ )*

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

et

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



Les conditions aux limites en  $x = 0$  et  $x = L$  (continuités de la fonction d'onde et de sa dérivée) donnent :

$$\begin{cases} A + B = C + D & \text{et} & ik(A - B) = \alpha(C - D) \\ Ce^{\alpha L} + De^{-\alpha L} = Fe^{ikL} & \text{et} & \alpha(Ce^{\alpha L} - De^{-\alpha L}) = ikFe^{ikL} \end{cases}$$

Après calculs :

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

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

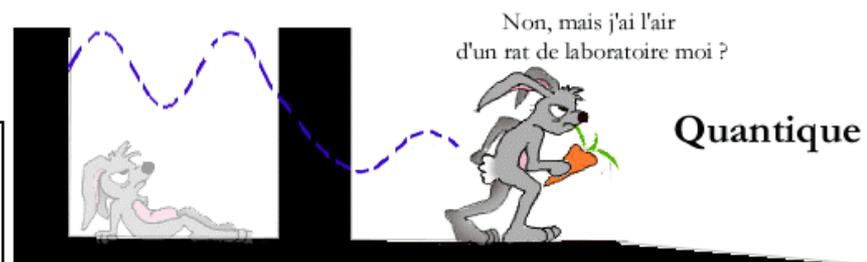
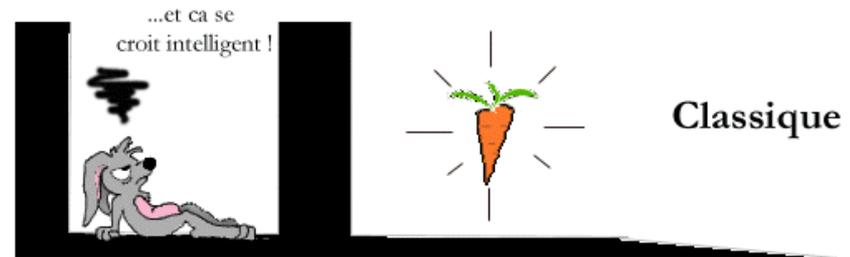
$$t = \frac{F}{A} \approx \frac{4}{\left(1 + \frac{i\alpha}{k}\right)\left(1 - \frac{ik}{\alpha}\right)e^{\alpha L}e^{ikL}} = \frac{4e^{-\alpha L}}{2 + \frac{i\alpha}{k} - \frac{ik}{\alpha}}e^{-ikL}$$

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

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

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

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



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

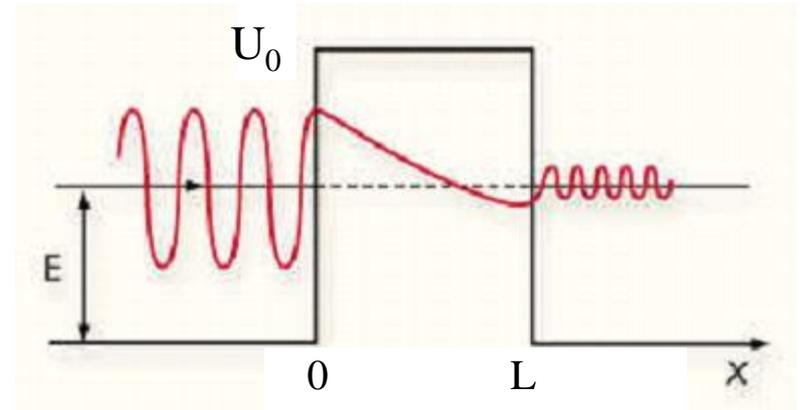
Un « tunnel » s'est creusé dans la barrière de potentiel !

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

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

alors

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



Tracé de la densité de probabilité

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

Un exercice sur  
l'effet tunnel :  
cliquer [ICI](#)

Quelques données numériques :

\* Pour un électron :  $U_0 = 1 \text{ eV}$  et  $L = 0,3 \text{ nm}$  :  $\delta = 0,3 \text{ nm}$  et  $T = 0,14$

$U_0 = 1 \text{ eV}$  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  $L = 0,3 \text{ nm}$  :  $\delta = 7 \cdot 10^{-12} \text{ m}$  et  $T = 6 \cdot 10^{-38} !!$

**Utilisation de la relation d'indétermination temporelle :**

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar / 2$$

Soit  $E$  l'énergie de la particule.

Supposons que :  $E + \Delta E \geq V_0$

La particule quantique peut passer au – dessus de la barrière avec une vitesse de l'ordre de :

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

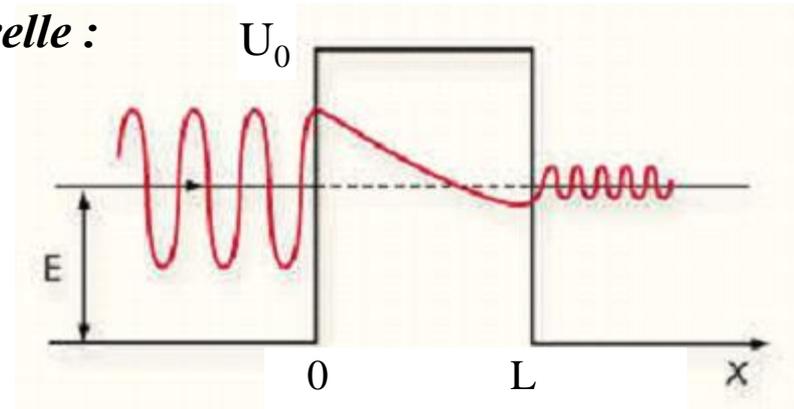
L'indétermination temporelle vaut :  $\Delta t = \frac{\hbar}{2\Delta E}$

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

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

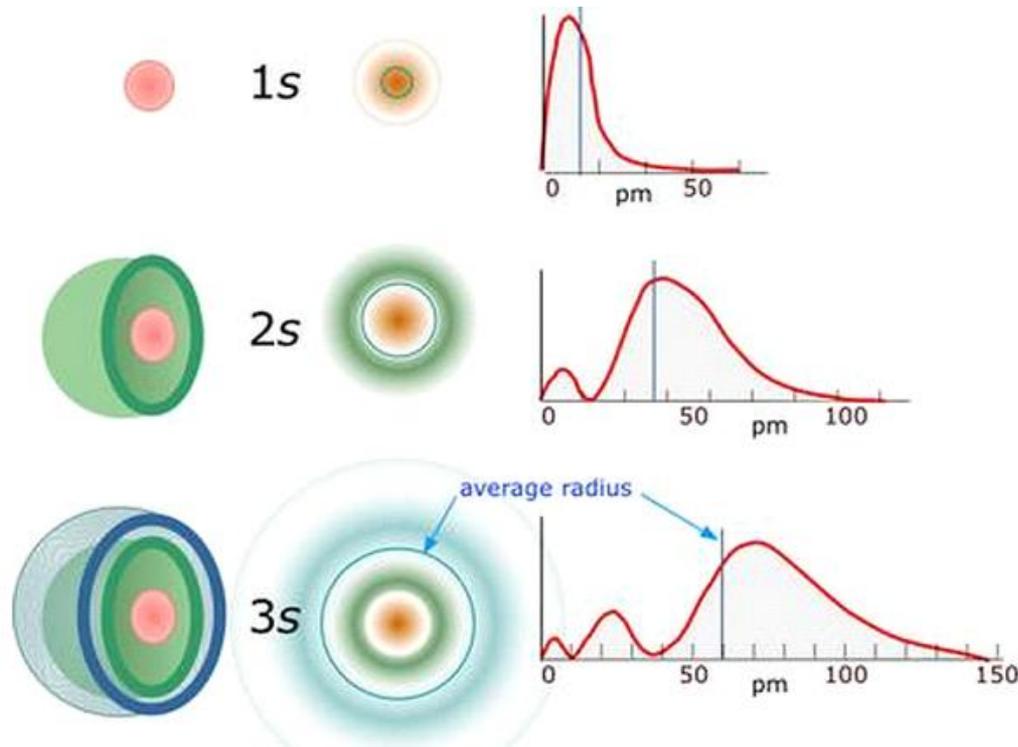
Cette longueur est maximale pour  $\Delta E = 2(U_0 - E)$  et vaut :

$$\ell_{max} = \frac{\hbar}{4\sqrt{2m(U_0 - E)}} \approx \delta$$

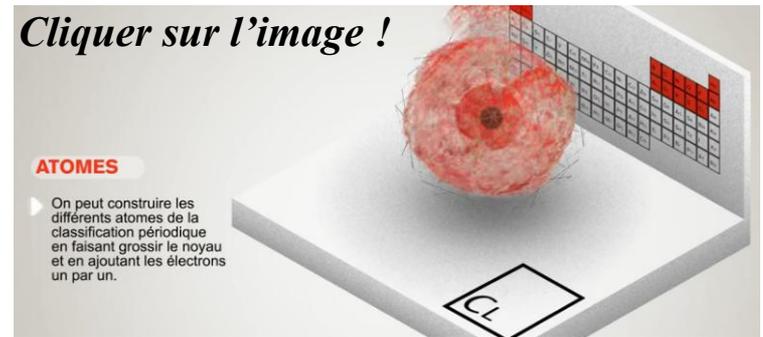


**Tracé de la densité de probabilité**

# L'atome d'hydrogène, le potentiel en $1/r$ :



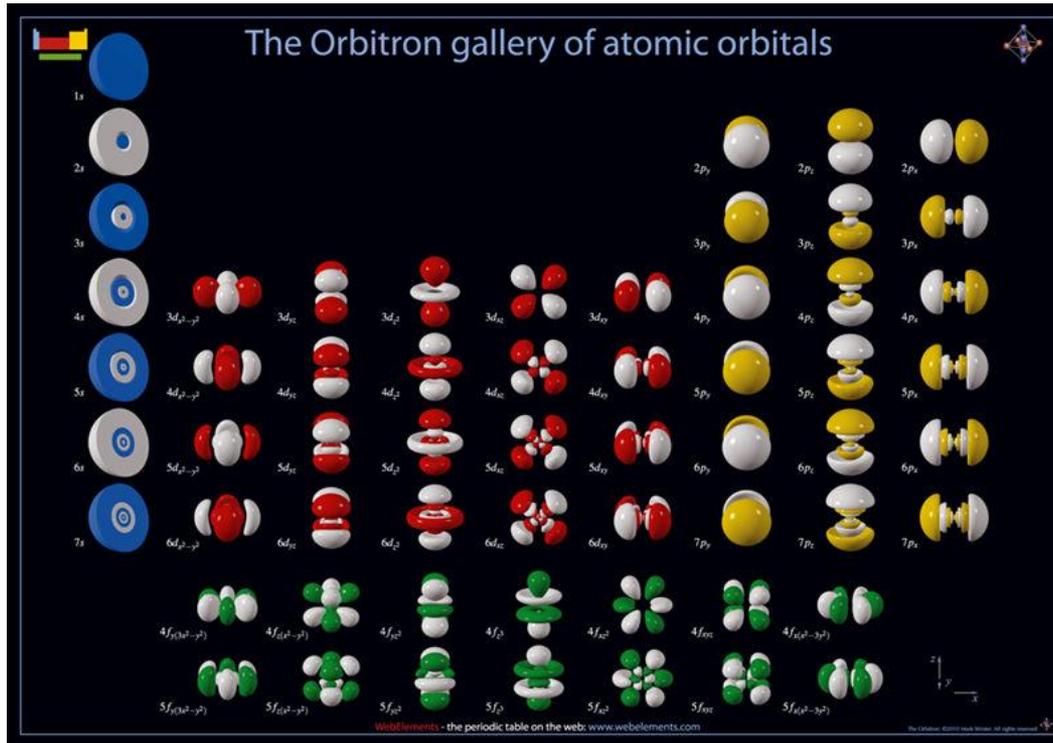
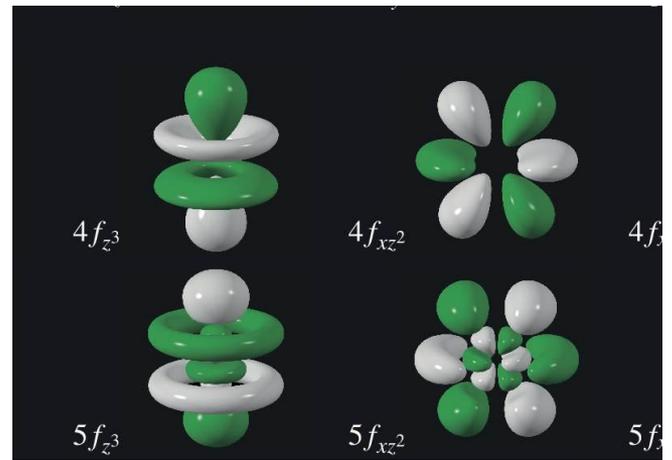
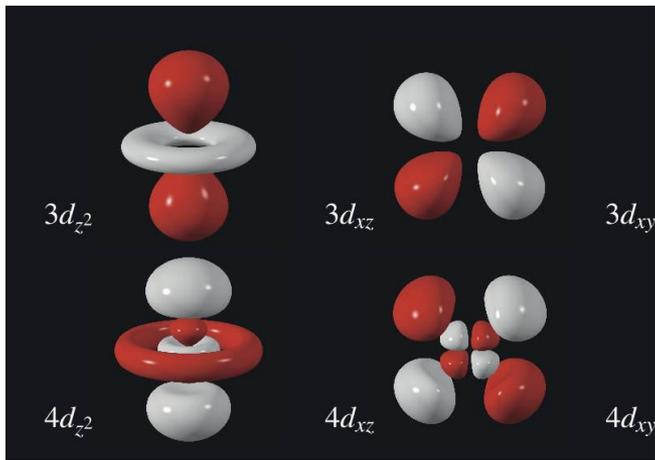
*Densités de probabilités de présence pour un électron dans un atome d'hydrogène, en fonction de la distance au noyau.*



*Lien sur Internet*

Ces densités constituent des zones où elles sont maximales et s'organisent en une à trois « coquilles emboîtées ».

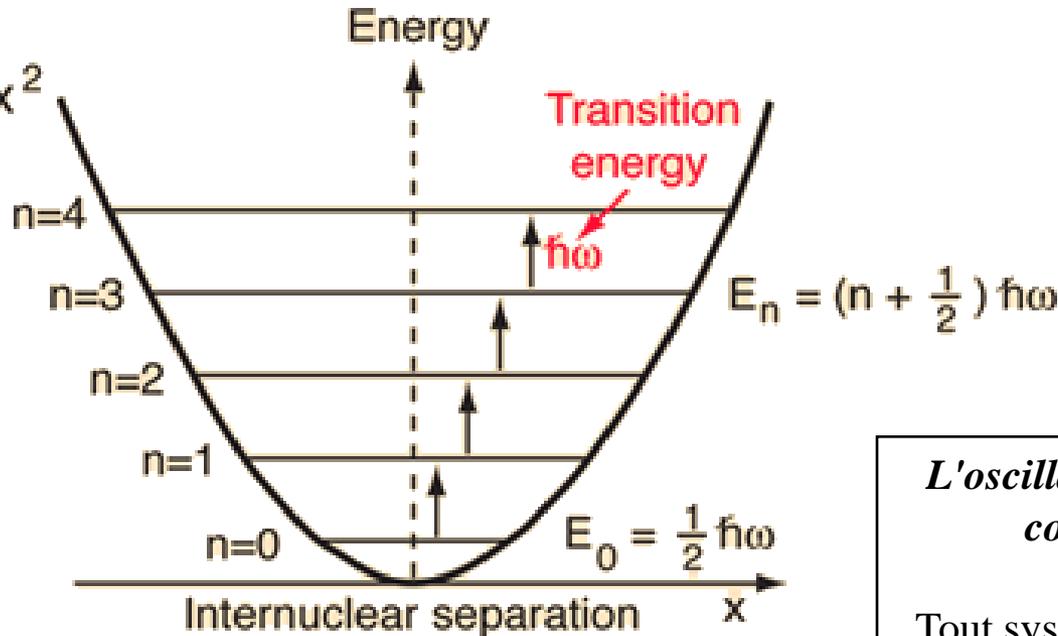
Ces densités ont une forme analogue à celle des amplitudes d'ondes stationnaires avec des nœuds et des ventres, dans le cas des cordes et des membranes vibrantes.



# L'oscillateur harmonique quantique :

Potential energy  
of form

$$\frac{1}{2}kx^2$$



*Cliquer sur l'image pour avoir la théorie de  
l'oscillateur harmonique quantique.*

*(Hors programme)*

*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.

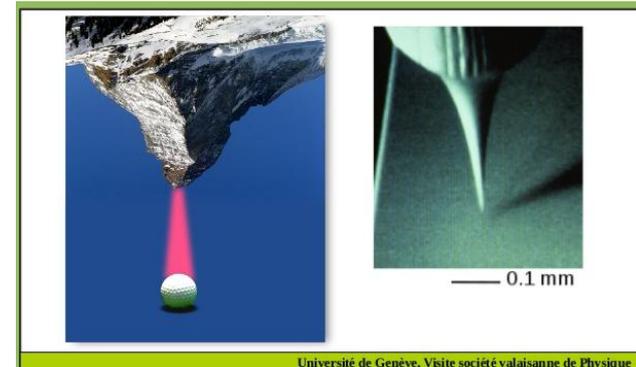
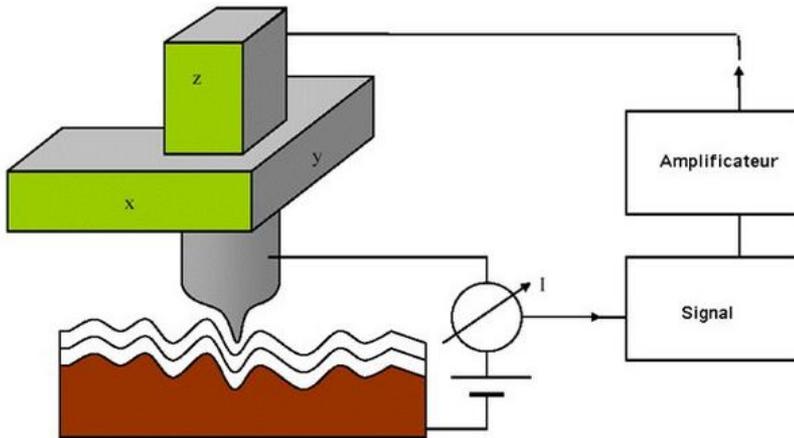
### 3. Quelques applications :

#### La microscopie à effet tunnel (Voir analyse documentaire) :

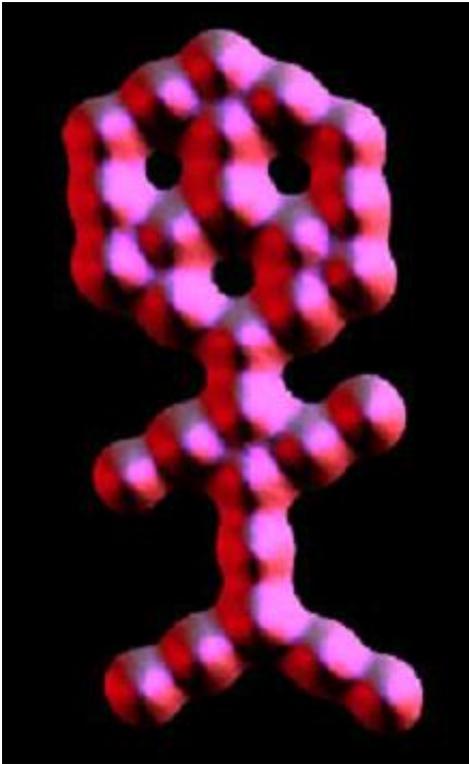


*Lien sur Internet*

*En 1981, G Binnig et H Rohrer construisent le microscope à effet tunnel (Prix Nobel en 1986)*



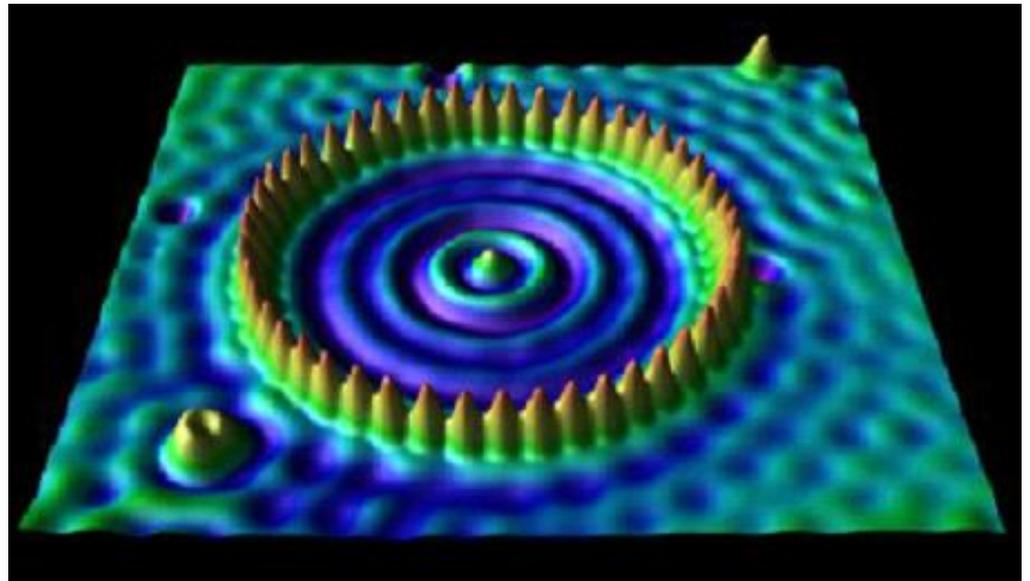
*Un diaporama d'introduction au microscope à effet tunnel (cliquer sur l'image)*



**« Carbone homme »**

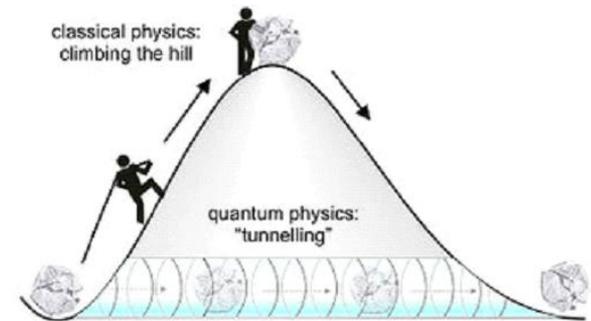
*Liaisons C – O sur une surface de platine.  
(visualisations de mesures expérimentales)*

*Cliquer sur l'image !*



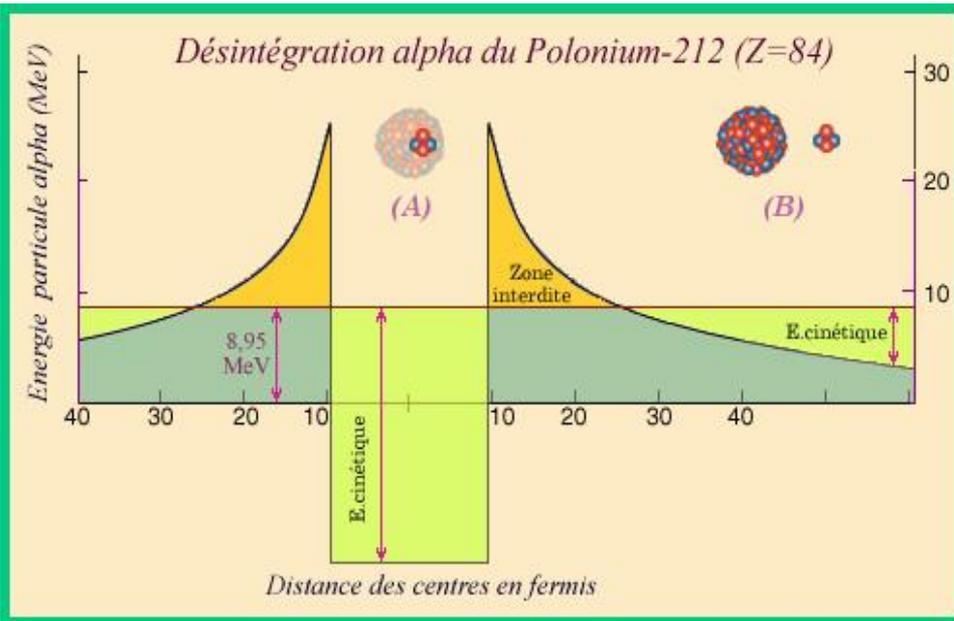
***Un anneau d'atomes (barrière de corail)***

*48 atomes de Fer rangés sur une surface de cuivre  
(image virtuelle reconstruite par ordinateur)*

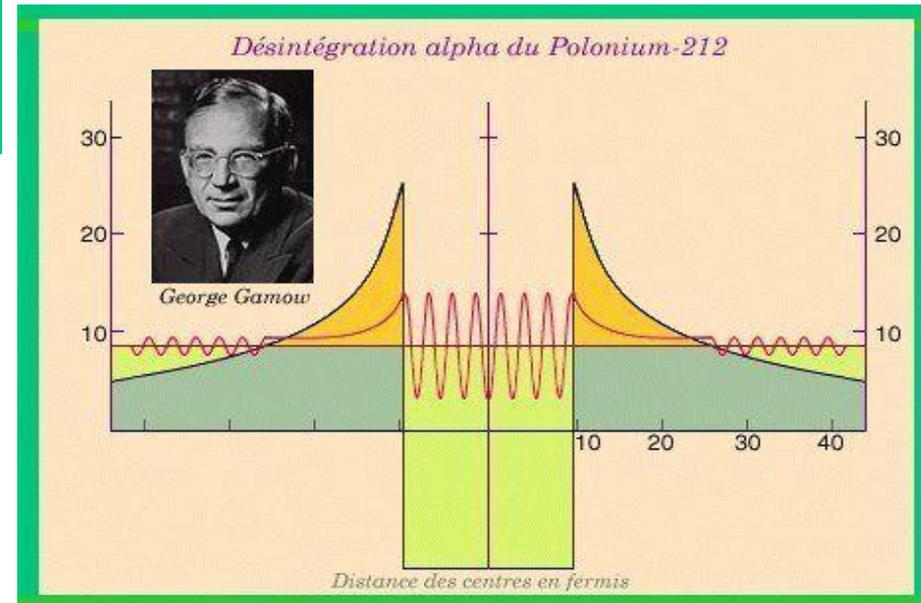


***Le nanomonde dans la médecine  
(cliquer sur l'image)***

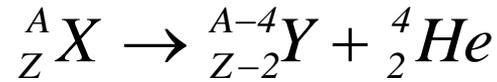
# La radioactivité alpha (Voir analyse documentaire) :



*Cliquer sur les images !*



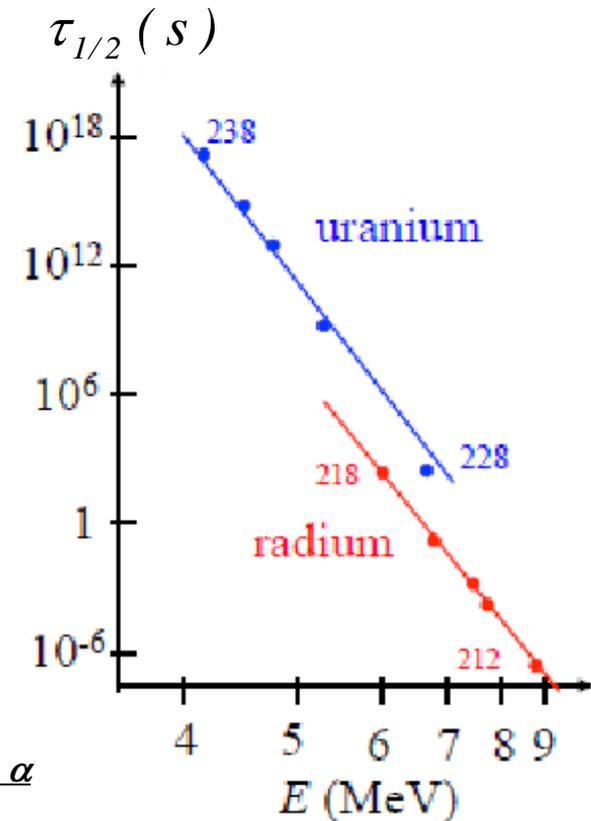
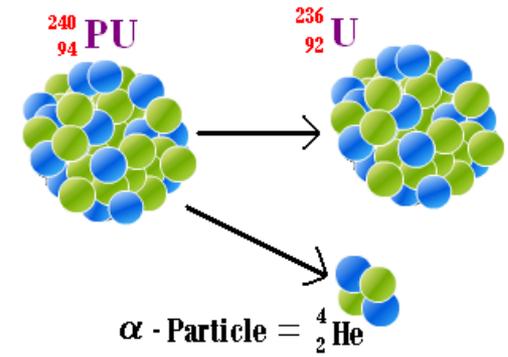
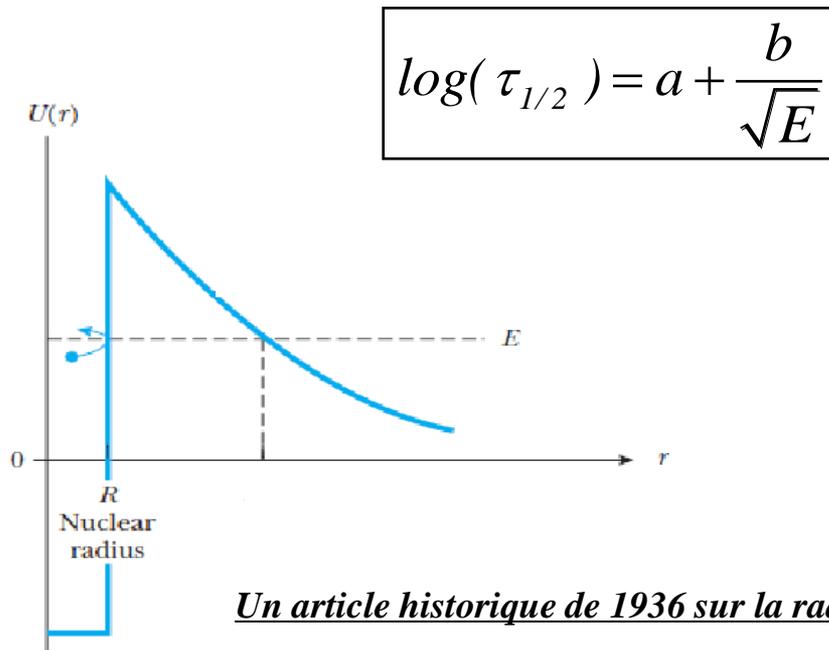
# Caractéristiques de l'émission $\alpha$ (noyau d'hélium He) :

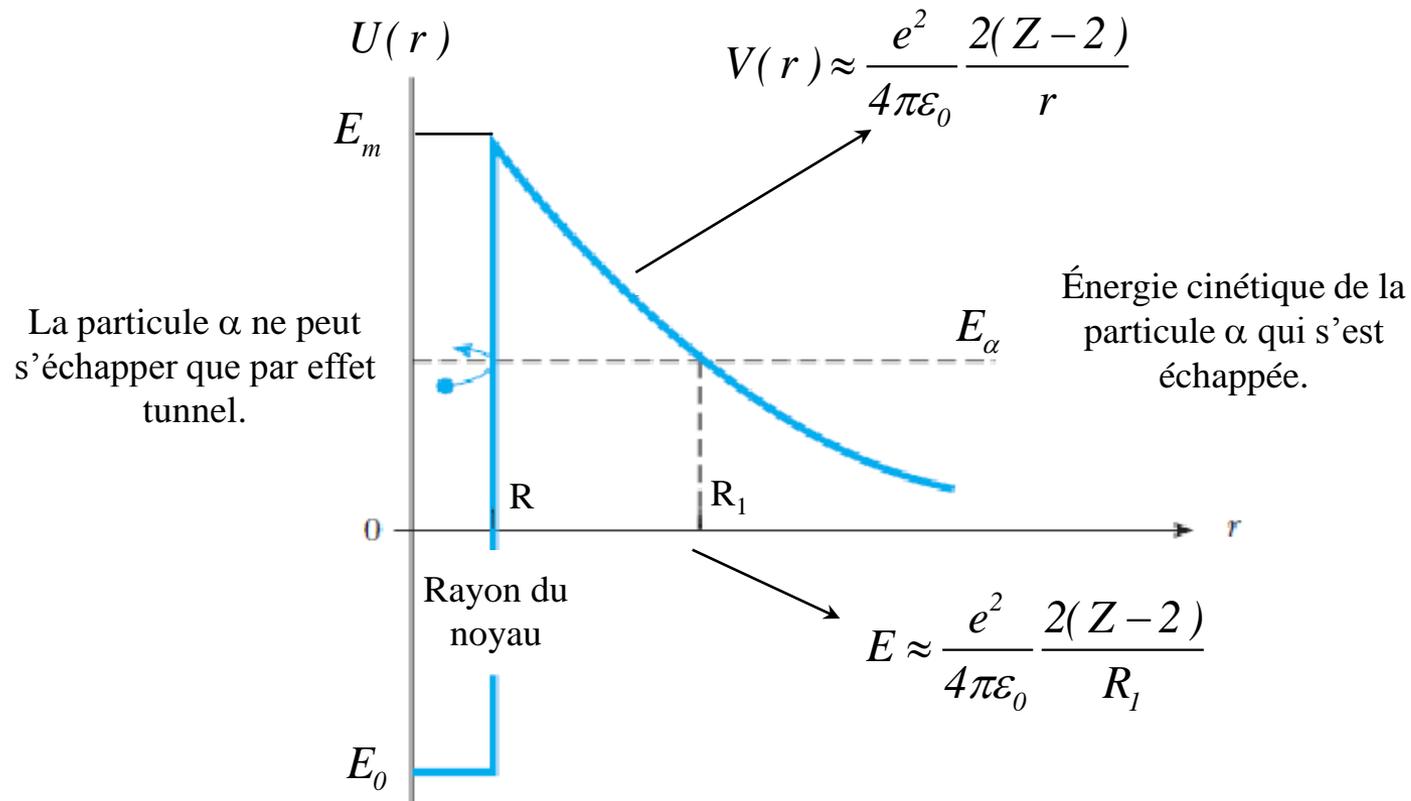


Énergie de la particule  $\alpha$  : E entre 4 et 9 MeV

Demi-vie (période radioactive) :  $\tau_{1/2}$  entre  $10^{-6}$  et  $10^{18}$  s.

Modèle proposé par Gamow en 1928 :



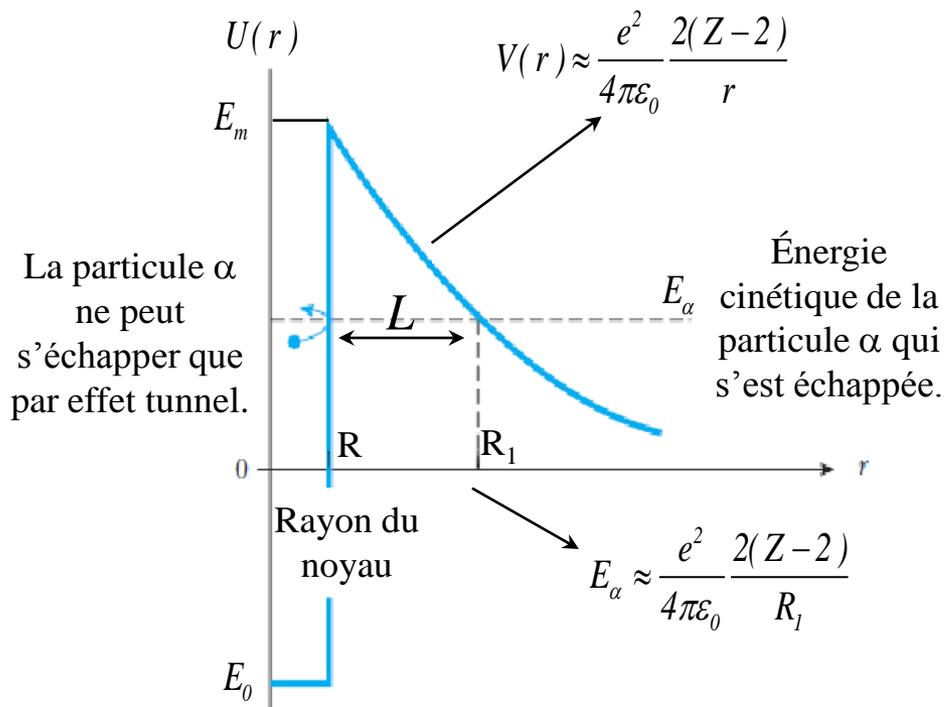


Le rayon du noyau est :

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

Quelques ordres de grandeur :

$$E_0 = -40 \text{ MeV} \quad ; \quad E_m = 20 \text{ MeV} \quad ; \quad E_\alpha = 4 \text{ MeV}$$



Largeur de la barrière de potentiel :

$$L = R_1 - R$$

Avec :

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

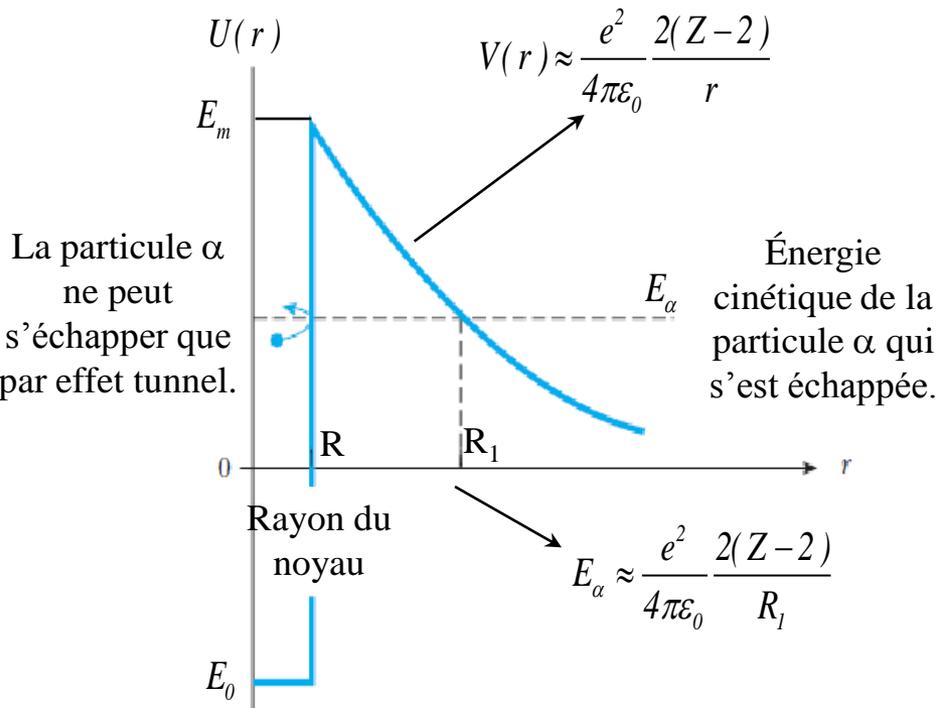
On assimile la barrière coulombienne à une barrière rectangulaire de largeur  $L$  et de hauteur  $E_m$ .

Le coefficient de transmission de la barrière est alors :

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

Avec ( $m_\alpha$  est la masse de la particule  $\alpha$ ) :

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



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

$$E_\alpha = \frac{1}{2} m_\alpha v_\alpha^2 \quad \text{soit} \quad v_\alpha = \sqrt{\frac{2E_\alpha}{m_\alpha}}$$

La particule parcourt un diamètre en :

$$t_0 = \frac{2R}{v}$$

$$AN : E_\alpha = 4 \text{ MeV}; v_\alpha \approx 10^7 \text{ m.s}^{-1}; t_0 \approx 10^{-21} \text{ s}$$

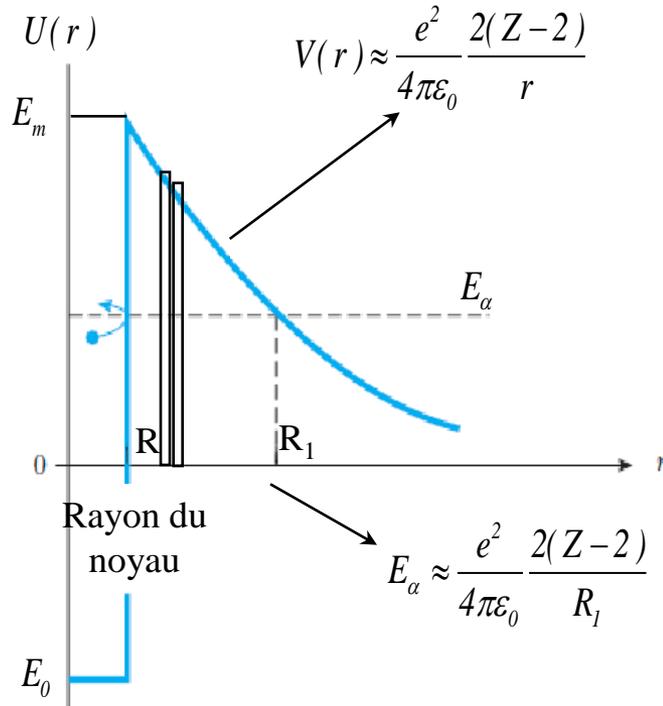
On déduit la relation suivante entre  $t_0$ ,  $\tau_{1/2}$  et  $T(E_\alpha)$  :

$$\tau_{1/2} \approx \frac{1}{T(E_\alpha)} t_0$$

**Modèle trop simpliste !**

$$AN : \delta \approx 10^{-15} \text{ m}; t_0 \approx 10^{-21} \text{ s}; T(E_\alpha) \approx 2 \cdot 10^{-36}; \tau_{1/2} \approx 10^{14} \text{ s}$$

## 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  $dr$ .

En supposant ces barrières épaisses, on a :

$$\frac{dT}{T} = -(2 / \delta) dr \quad \text{avec} \quad \delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_\alpha(U(r) - E_\alpha)}}$$

Par intégration :

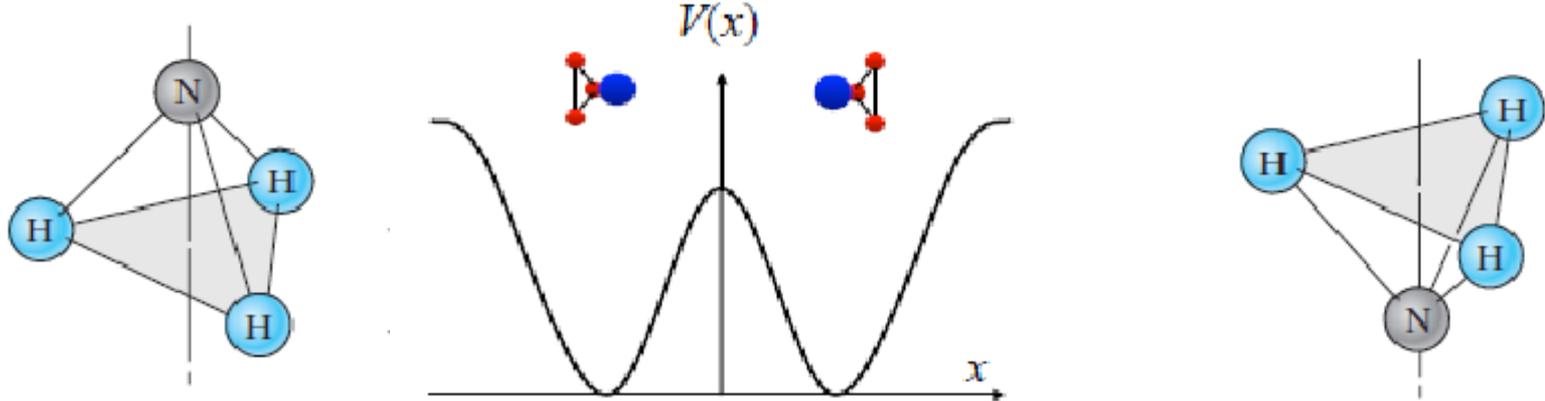
$$\ln T = -2 \int_R^{R_1} \frac{1}{\delta} dr = -2 \int_R^{R_1} \frac{\sqrt{2m_\alpha(U(r) - E_\alpha)}}{\hbar} dr$$

Avec  $U(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2(Z-2)e^2}{r}$  (Barrière coulombienne entre la particule  $\alpha$  et le noyau de charge  $(Z-2)e$ )

Après calculs :

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

# Le double puits symétrique (cas de la molécule d'ammoniac) :



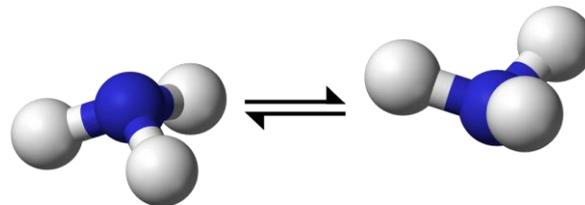
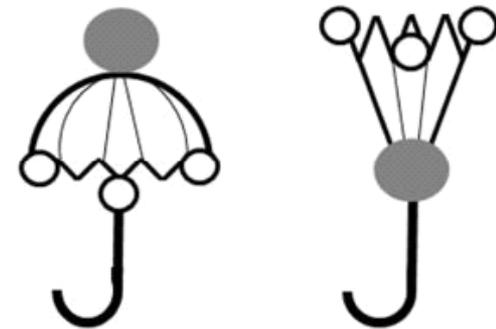
*Potentiel de l'azote en fonction de sa distance au plan des hydrogènes*

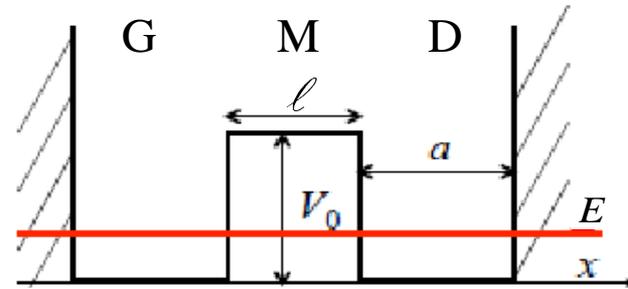
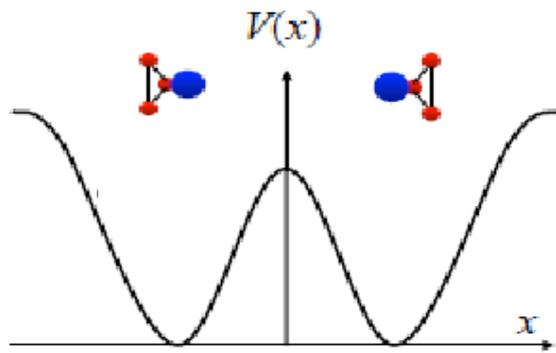
Les atomes d'hydrogène sont aux sommets d'un triangle équilatéral.

Il existe deux positions d'équilibre « stable » de l'atome d'azote, de part et d'autre de la barrière de potentiel.

La molécule peut se retourner comme un parapluie.

Il y a superposition des deux états quantiques, couplés par effet tunnel.





**On s'intéresse aux niveaux d'énergie  $E < V_0$  : quel est le rôle de l'effet tunnel à travers la barrière ?**

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

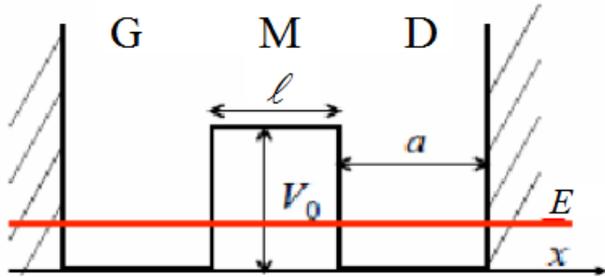
$$\varphi(-x) = \varphi(x) \quad \text{ou} \quad \varphi(-x) = -\varphi(x)$$

**Modélisation du double puits de potentiel :**

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

La particule quantique peut traverser la barrière par effet tunnel : son domaine accessible sera l'intervalle

$$\left] -a - \frac{\ell}{2}; a + \frac{\ell}{2} \right[ . \text{Les deux puits de potentiel sont couplés par effet tunnel.}$$



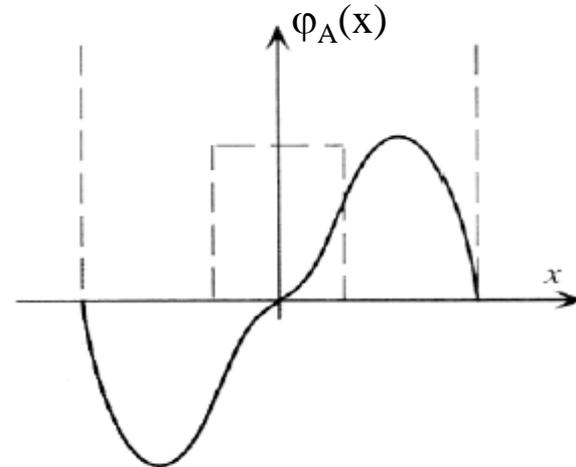
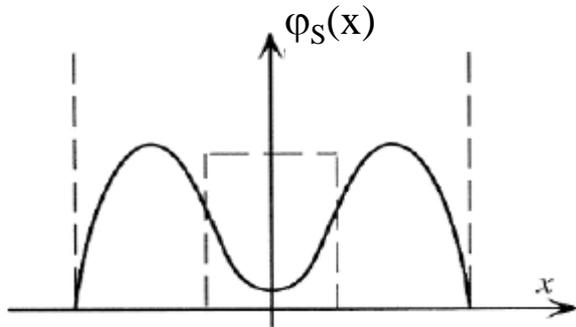
On note :

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

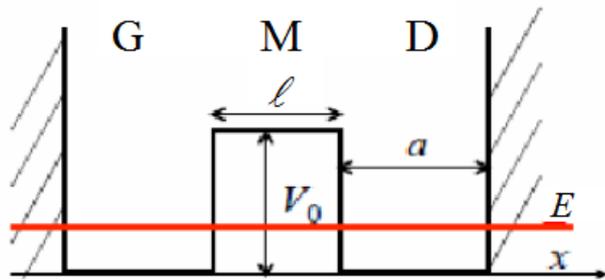
Région (G) :  $\varphi_S(x) = \lambda \sin k(a + \frac{\ell}{2} + x)$  et  $\varphi_A(x) = -\lambda \sin k(a + \frac{\ell}{2} + x)$

Région (M) :  $\varphi_S(x) = \mu \cosh(\alpha x)$  et  $\varphi_A(x) = \mu \sinh(\alpha x)$

Région (D) :  $\varphi_S(x) = \varphi_A(x) = \lambda \sin k(a + \frac{\ell}{2} - x)$



La particule peut se retrouver entre  $-\ell / 2$  et  $\ell / 2$ .



La continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en  $x = \pm \ell / 2$  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  $\alpha \approx \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} = cste$
- \*  $\alpha\ell \gg 1$  (valable pour  $NH_3$ )

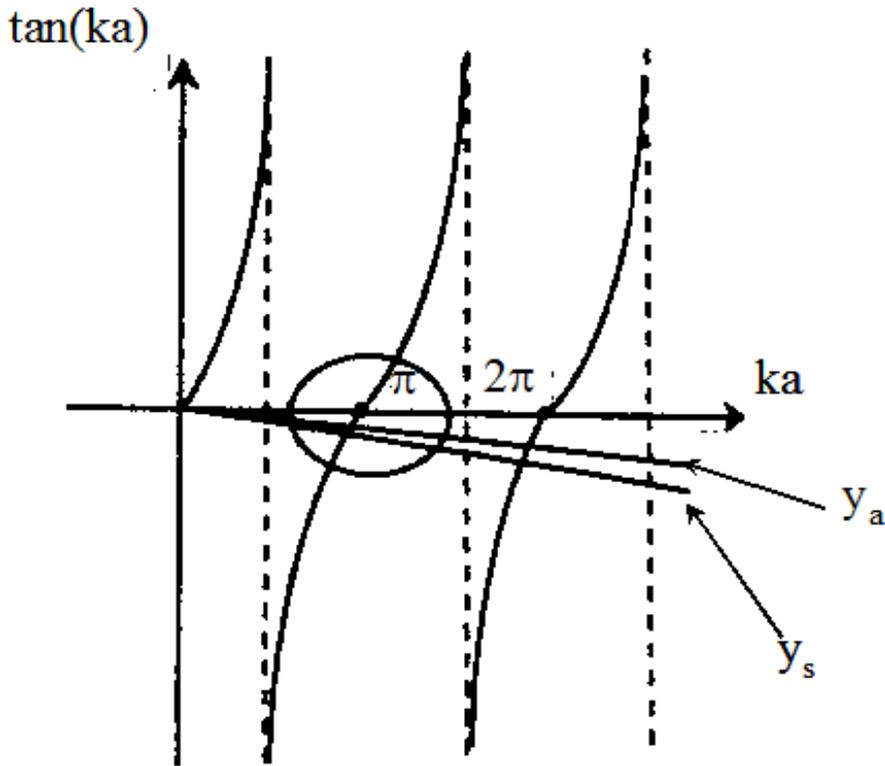
Alors :

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

## Résolution graphique :

On note :  $y_S = -\frac{1}{\alpha a}(1 + 2e^{-\alpha \ell})ka$  et  $y_A = -\frac{1}{\alpha a}(1 - 2e^{-\alpha \ell})ka$

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 constate que (mode fondamental) :

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

Et, par conséquent :

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

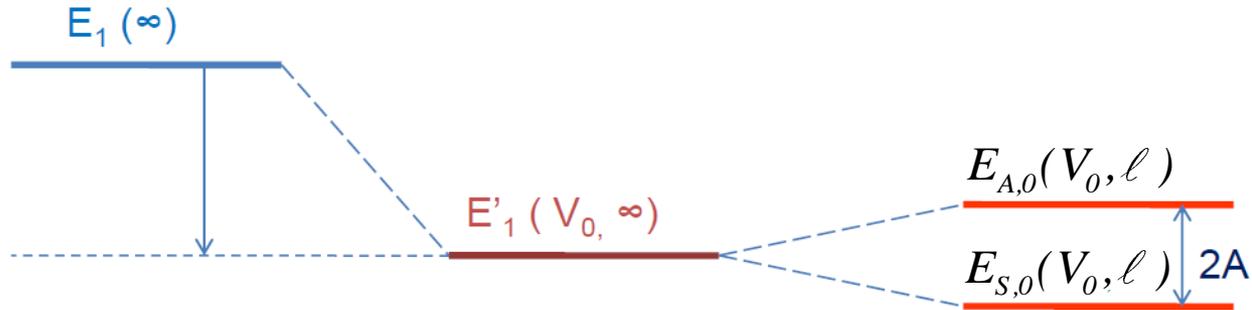
*L'état symétrique est le plus lié (il y a dégénérescence de l'état fondamental).*

On montre que :

$$E'_0 = \frac{E_A + E_S}{2} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left( 1 - \frac{2}{\alpha a} \right)$$

et

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

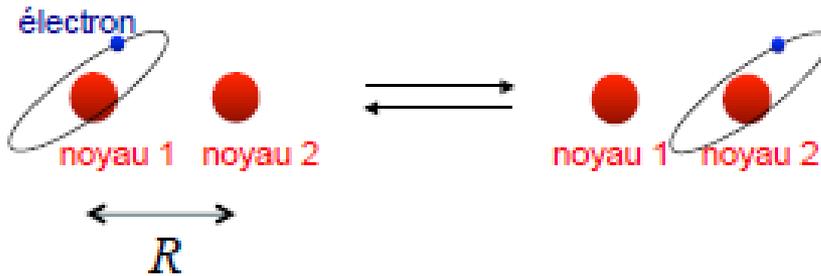


La différence d'énergie  $2A$  tend de manière exponentielle vers 0 lorsque la largeur  $\ell$  ou la hauteur de la barrière  $V_0$  augmentent.

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.*

## Applications à la liaison chimique :



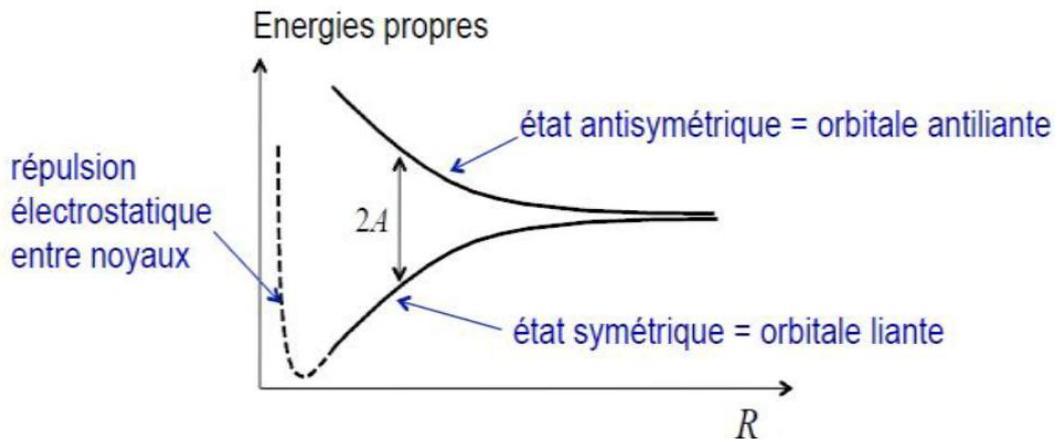
*La différence d'énergie  $2A$  (« le clivage ») dépend de la distance  $R$  entre les noyaux.*

### Exemple de l'ion $H_2^+$ : (deux proton et un seul électron)

Par effet tunnel, le fait d'appartenir aux deux protons à la fois stabilise l'électron.

Cet effet augmente si la distance entre les protons diminue. Mais il doit s'établir un compromis avec la répulsion coulombienne des protons, donc un équilibre.

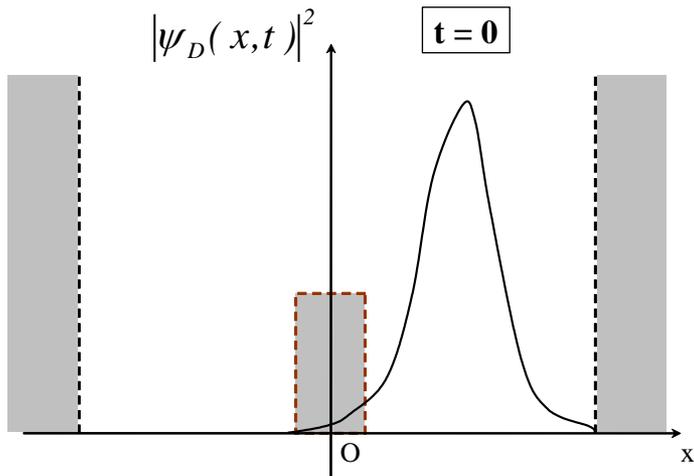
L'ion  $H_2^+$  est finalement lié.



*Si on rajoute le spin et le principe de Pauli, on explique ainsi le principe de la liaison covalente.*

*L'effet tunnel est responsable de notre existence !*

## Oscillations quantiques :



On considère l'état initial suivant :

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

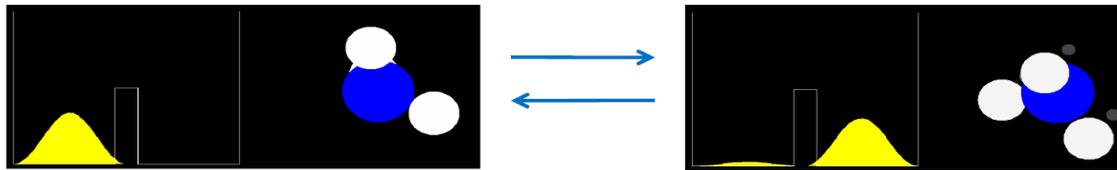
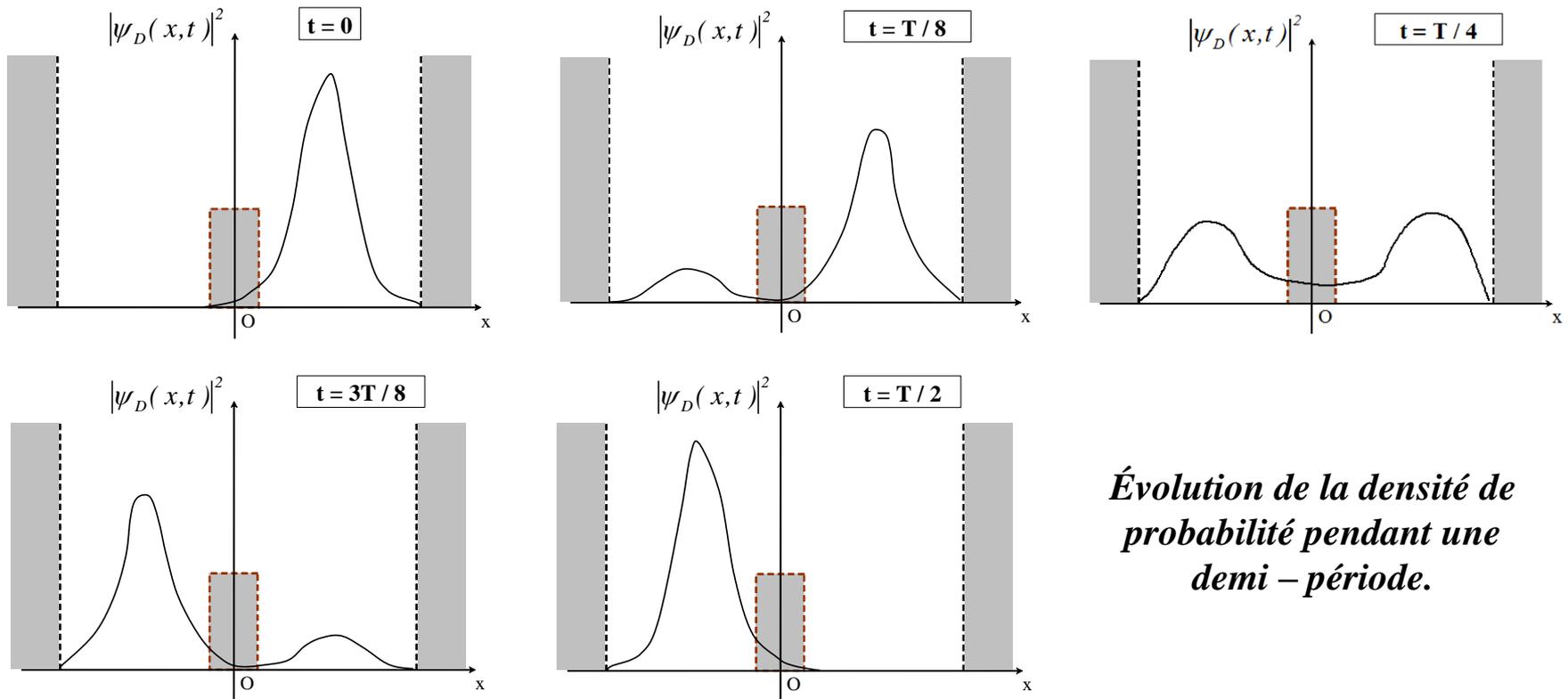
Cette fonction d'onde décrit un état où pratiquement toute la probabilité de présence de la particule est concentrée à droite

(la molécule d'azote est à droite du plan des atomes d'hydrogène)

Comment cet état évolue-t-il avec le temps ? (ce n'est pas un état stationnaire, d'énergie bien déterminée)

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

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



*Oscillations quantiques de fréquence et de période :*

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

*(Ondes centimétriques ou micro-ondes)*

**Quelques applications :**

*Dans les laboratoires :*

**Applications laboratoires**

*Dans l'industrie :*

**Applications industrie**

# Quelques références

*La physique quantique vue par Philippe Grangier :*

[http://www.canal-u.tv/video/universite\\_de\\_tous\\_les\\_savoirs/la\\_physique\\_quantique\\_philippe\\_grangier.1434](http://www.canal-u.tv/video/universite_de_tous_les_savoirs/la_physique_quantique_philippe_grangier.1434)

*La physique quantique vue par Alexandre Astier :*

<https://www.youtube.com/watch?v=8mSed9Du0kU>

*Vidéos du MIT :*

<http://ocw.mit.edu/courses/physics/8-05-quantum-physics-ii-fall-2013/video-lectures/>

*Vidéos de l'École Polytechnique :*

<http://www.physique.polytechnique.edu/accueil/cours-en-ligne/enregistrements-videos-mecanique-quantique-x2013-308553.kjsp?RH=1253779134568>

*Vidéos de Mécanique quantique (Unisciel) :*

[http://www.canal-u.tv/themes/sciences\\_fondamentales/physique/theories\\_quantique\\_et\\_relativiste](http://www.canal-u.tv/themes/sciences_fondamentales/physique/theories_quantique_et_relativiste)

*Manipulation et visualisation des ondes de matière :*

[http://www.canal-u.tv/video/universite\\_de\\_tous\\_les\\_savoirs/manipulation\\_et\\_visualisation\\_des\\_ondes\\_de\\_matiere.1219](http://www.canal-u.tv/video/universite_de_tous_les_savoirs/manipulation_et_visualisation_des_ondes_de_matiere.1219)

# Quelques références

*Le boson de Higgs ?*

[http://www.canal-u.tv/video/universite\\_paris\\_diderot/13min\\_le\\_boson\\_de\\_higgs\\_etienne\\_klein.12448](http://www.canal-u.tv/video/universite_paris_diderot/13min_le_boson_de_higgs_etienne_klein.12448)

*Un peu d'histoire de la mécanique quantique :*

<http://rpn.univ-lorraine.fr/UNIT/physique-quantique-volet1/co/histoire.html>

*Fenêtre ouverte sur la mécanique quantique :*

<http://culturesciencesphysique.ens-lyon.fr/ressource/Quantique.xml#N1033C>

*Étude de l'effet tunnel dans une hétérostructure semi-conductrice ZnO/(Zn,Mg)O*

<http://physique.unice.fr/sem6/2013-2014/PagesWeb/PT/Heterostructure/page1.html>